

Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química

CONSTRUCCIÓN Y ANÁLISIS DE FUNCIONES
DE SCAR. APLICACIÓN A UN OSCILADOR
CÚARTICO Y SISTEMAS MOLECULARES

Lara Hernando Orden

Madrid, 19 de Diciembre de 2006

Trabajo dirigido por Florentino Borondo Rodríguez
para optar al
título de doctora en Ciencias Químicas

Índice general

1. Introducción	1
2. Mecánica clásica	5
2.1. Formalismo clásico Hamiltoniano. Formulación simpléctica . . .	5
2.2. Dinámica linearizada y estabilidad de trayectorias	8
2.2.1. Estabilidad de órbitas periódicas	12
2.3. Sistemas Hamiltonianos integrables	14
2.3.1. Variables de acción-ángulo	15
2.3.2. Espacio de fases de un sistema integrable. Sistemas ligados	17
2.3.3. Espacio de fases de un sistema integrable. Sistemas no ligados	19
2.4. Sistemas Hamiltonianos no integrables. Caos	20
2.4.1. Sistemas no integrables conservativos ligados	26
2.4.2. Sistemas no integrables conservativos no ligados	28
2.4.3. Sistemas no integrables disipativos	30
3. Correspondencia clásico-cuántica	31
3.1. Formalismo cuántico. Sistemas conservativos integrables	31
3.2. Sistemas conservativos no integrables. ¿Caos?	33
3.2.1. Fórmula traza de Gutzwiller	35
3.2.2. Estadística de Autovalores.	36
3.2.3. Scars	38
4. Scars. Construcción de funciones de scar	41
4.1. Introducción	41
4.2. Construcción de la función de scar	45
4.2.1. Propagador semiclásico para paquetes de onda	46
Propagador clásico en la aproximación de órbitas cercanas	46
Propagador semiclásico	49

5. Espectroscopia	55
5.1. Formulación dependiente del tiempo de la espectroscopia	55
5.2. Cálculo teórico de espectros	57
5.3. Espectros de resolución finita	59
5.3.1. Ventana temporal dada por un pulso rectangular	60
5.3.2. Ventana temporal gaussiana	61
5.3.3. Pulso sinusoidal	62
5.3.4. Estados cuánticos asociados	64
5.3.5. Determinación de los anchos de banda en el espectro suavizado	64
6. Funciones de distribución en el espacio de fases	65
6.1. Introducción	65
6.2. Definición de las funciones de distribución	66
6.3. La función de distribución de Wigner	68
6.4. Funciones de distribución normal y antinormal.	69
6.4.1. Función de distribución de Husimi	71
6.4.2. Función de distribución de Husimi en el espacio de fases (\mathbf{q}, \mathbf{p})	73
Superficies de Poincaré cuánticas	74
6.5. Propiedades de las funciones de distribución	75
7. Construcción y análisis de funciones de scar. Oscilador cuártico	79
7.1. Aspectos clásicos del oscilador cuártico	79
7.2. Estudio cuántico del oscilador cuántico	83
7.2.1. Propiedades de escalado	83
7.2.2. Autofunciones y autovalores	84
7.3. Funciones de scar en el oscilador cuártico. Órbita cuadrada	87
7.3.1. Espectroscopia del sistema cuártico. Espectro de resolución infinita	93
7.3.2. Espectroscopia del sistema cuártico. Espectro de resolución finita	98
Estructura hiperbólica de la órbita cuadrada	101
Determinación de los anchos de banda del espectro suavizado y relación con las áreas definidas por la estructura hiperbólica del sistema	105
Influencia de órbitas periódicas relacionadas con la estructura hiperbólica en la construcción de scars .	114
7.3.3. Análisis de la distribución de Husimi en el espacio de fases	117
7.4. Funciones de scar en el oscilador cuártico. Órbita lazo	119
7.4.1. Espectroscopia de las funciones de scar para la órbita lazo.	120

7.4.2.	Análisis de la distribución de Husimi en el espacio de fases	124
8.	Funciones de scar en el sistema molecular LiCN-LiNC	127
8.1.	Introducción	127
8.2.	Estudio cuántico del sistema molecular LiCN-LiNC	128
8.3.	Superficie de Energía Potencial <i>SEP</i>	130
8.4.	Estudio clásico del sistema molecular LiCN-LiNC	131
8.5.	Scars en el sistema molecular LiCN-LiNC	132
9.	Conclusiones	135
A.	Índices de Maslov	139
A.1.	Teoría WKB	139
A.2.	Función del índice de Maslov. Índice de Maslov	140
A.3.	Mecánica semiclásica y condiciones de cuantización	142
B.	Traslaciones en el espacio de fases. Operadores de Heisenberg	145
B.1.	Operadores de Heisenberg en mecánica clásica	145
B.2.	Operadores de Heisenberg en mecánica cuántica	146
B.2.1.	Propiedades de los operadores de Heisenberg	148
C.	Operadores metapléticos	149
D.	Primeras 160 autofunciones de simetría A_1 del oscilador cuártico y sus energías	151
E.	Funciones de scar sobre la órbita periódica lazo	161

Índice de figuras

2.1. Órbitas próximas en el espacio de fases	9
2.2. Variedades estable e inestable en las cercanías de un punto fijo en el plano (x, P_x)	14
2.3. Toros invariantes en un sistema integrable con dos grados de libertad	17
2.4. Espacio de fases para un potencial armónico	18
2.5. Espacio de fases para un potencial cúbico	19
2.6. Conjunto de Cantor	22
2.7. Mapa estándar	24
2.8. Aspecto esquemático del espacio de fases de un sistema no integrable	26
2.9. Redes homoclínicas y heteroclínicas esquemáticas	27
2.10. Sistema no integrable conservativo no ligado	29
3.1. Estadística de espaciado de los niveles de energía de un átomo de hidrógeno sometido a un fuerte campo magnético	38
4.1. Funciones de scar en el estadio de Bunimovich	42
4.2. Evolución de una función de distribución $f(\mathbf{z}, t)$ en la aproximación de órbitas cercanas	48
5.1. Proceso de fotodisociación	56
5.2. Ventana temporal para un pulso cuadrado y su correspondiente transformada de Fourier.	60
5.3. Ventana temporal gaussiana y su correspondiente transformada de Fourier.	61
5.4. Ventana temporal para un pulso sinusoidal y su correspondiente transformada de Fourier.	63
7.1. Algunas órbitas periódicas inestables del sistema cuártico	80
7.2. Intensidad $(\Psi ^2)$ de las primeras 20 autofunciones del sistema cuártico en el espacio de configuraciones.	88

7.3.	Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita cuadrada cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 2 y 7	92
7.4.	Cont. fig. (7.3) Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita cuadrada cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 8 y 11	93
7.5.	Espectro de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 6$	95
7.6.	Autofunciones del estado cuártico que participan en mayor medida en la función de scar sobre a órbita cuadrada para $n = 6$	96
7.7.	Función de scar sobre la órbita cuadrada para $n = 6$ construida a partir de la combinación lineal de las funciones de la figura (7.6)	97
7.8.	Espectro de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 2 - 11$	97
7.9.	Espectro suavizado de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 6$	99
7.10.	Espectro suavizado de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 2 - 11$	100
7.11.	Superficie de sección de Poincaré $y = 0$ para la órbita cuadrada del oscilador cuántico con $n = 5$	101
7.12.	Estructura hiperbólica para la órbita cuadrada en la SSP $y = 0$	105
7.13.	Área del circuito homoclínico más corto para la órbita cuadrada con $n = 5$ en la SSP $y = 0$	106
7.14.	Áreas de los principales circuitos heteroclínicos para la órbita cuadrada con $n = 5$ en la SSP $y = 0$	106
7.15.	Anchos de las bandas del espectro suavizado (7.10) para $\Delta t = 1,3$ u.a.	108
7.16.	Espectro de Fourier de los anchos de banda del espectro suavizado.	109
7.17.	Espectro de Fourier de los anchos de banda oscilantes del espectro suavizado para $\tau = 1,3$ u.a. y frecuencias asociadas a las áreas de la estructura hiperbólica.	110
7.18.	Espectro de Fourier de los anchos de banda oscilantes del espectro suavizado para $\tau = 2$ u.a.	112
7.19.	Espectro suavizado para la función de scar sobre la órbita cuadrada para $\tau = 2,0$ u.a. y comportamiento oscilante de los anchos de banda.	113
7.20.	Puntos homoclínicos y heteroclínicos relevantes de la estructura hiperbólica de la órbita cuadrada	114
7.21.	Órbita periódica que conecta el circuito homoclínico más corto con la órbita cuadrada	115
7.22.	Órbitas periódicas que conectan los circuitos heteroclínicos más cortos con la órbita cuadrada	116

7.23. Distribuciones de Husimi en el espacio de fases para la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada	118
7.24. Distribución de Husimi en el espacio de fases para la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada para $t = 1,37$ u.a., similar al tiempo de Ehrenfest del sistema	119
7.25. Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 2 y 7	122
7.26. Cont. fig. (7.25). Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 8 y 11	123
7.27. Autoestado 42 del oscilador cuártico y espectro de la función de scar de la órbita lazo para $n = 11$	124
7.28. Autoestado 73 del oscilador cuártico y espectro de la función de scar de la órbita lazo para $n = 15$	124
7.29. Distribuciones de Husimi en el espacio de fases para la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada	126
8.1. Coordinadas internas para el LiCN	129
8.2. Contornos energéticos para la superficie de energía potencial del sistema LiCN-LiNC.	130
8.3. Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas en el sistema LiCN-LiNC	134
A.1. Diagrama del espacio de fases de un oscilador	141
D.1. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 1 - 20$ del sistema cuártico	153
D.2. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 21 - 40$ del sistema cuártico	154
D.3. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 41 - 60$ del sistema cuártico	155
D.4. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 61 - 80$ del sistema cuártico	156
D.5. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 81 - 100$ del sistema cuártico	157
D.6. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 101 - 120$ del sistema cuártico	158
D.7. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 121 - 140$ del sistema cuártico	159
D.8. Intensidad ($ \Psi(x, y) ^2$) para los estados $n = 141 - 160$ del sistema cuártico	160

E.1.	Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 2 y 5	161
E.2.	Cont. fig. (E). Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 6 y 13	162
E.3.	Cont. fig. (E). Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 14 y 21	163
E.4.	Cont. fig. (E). Intensidad ($ \Psi ^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK, con n comprendido entre 22 y 25	164

Capítulo 1

Introducción

En la segunda mitad del siglo XX se ha desarrollado notablemente el estudio de la dinámica no lineal de sistemas Hamiltonianos. Desde el punto de vista clásico éste puede dividirse en dos grandes bloques: el movimiento regular de los sistemas descritos por Hamiltonianos integrables, y el movimiento caótico, correspondiente a Hamiltonianos no integrables. Entre las diversas características de la dinámica caótica, una de las más conocidas es la sensibilidad exponencial a pequeñas variaciones en las condiciones iniciales, de modo que dos trayectorias originalmente próximas sufrirán localmente una separación exponencial en su evolución.

El fenómeno del caos se encuentra perfectamente definido en mecánica clásica, pero, ¿qué sucede cuando intentamos extender sus implicaciones a la mecánica cuántica? En mecánica cuántica el concepto clásico de trayectoria deja de tener sentido con el principio de incertidumbre de Heisenberg y no es posible definir el caos cuántico a partir de la sensibilidad a las condiciones iniciales. Surge entonces una polémica a la hora de definir el problema desde el punto de vista cuántico. En la actualidad, esta controversia está superada, y se acepta que el caos cuántico es la disciplina que estudia las propiedades cuánticas de sistemas clásicamente caóticos, y las manifestaciones de las estructuras clásicas subyacentes en estas propiedades cuánticas. Implícitamente el estudio del caos cuántico implica abordar el problema de la correspondencia entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica.

Dentro de los sistemas no integrables, tienen un interés especial los sistemas conservativos, en los que la energía total permanece constante, debido a que las fuerzas fundamentales de la naturaleza a nivel microscópico parecen ser conservativas. Debido a este hecho, el trabajo desarrollado en esta tesis va a ceñirse al estudio del caos cuántico y análisis del problema de la correspondencia clásico-cuántica

en sistemas conservativos no integrables.

El estudio del problema de la correspondencia clásico-cuántica en sistemas conservativos comienza con el desarrollo de condiciones de cuantización semiclásicas, cuyo origen se remonta a la condición de cuantización para el átomo de hidrógeno obtenida por Bohr. Esta condición fue generalizada para sistemas integrables N -dimensionales gracias a los trabajos de Epstein [1], Einstein [2], Brillouin [3] y Keller [4], y puede derivarse a partir de la teoría semiclásica WKB. Sin embargo, las técnicas semiclásicas desarrolladas para cuantizar y describir la dinámica de sistemas integrables (teoría WKB) en el límite semiclásico ($2\pi\hbar \rightarrow 0$) no son válidas en el caso de sistemas no integrables. A principios de los años 70, Gutzwiller introdujo una expresión [5] basada en la traza de la función de Green del propagador cuántico que permitía la cuantización de sistemas no integrables a partir del conjunto de órbitas periódicas clásicas del sistema. Esta contribución de Gutzwiller al desarrollo de técnicas semiclásicas para abordar la relación entre sistemas clásicamente caóticos y sus análogos cuánticos crea la base para el nacimiento de la disciplina del caos cuántico, y pone de manifiesto el papel fundamental de las órbitas periódicas en el problema de la correspondencia.

En 1984 surge una de las teorías fundamentales del caos cuántico: la teoría de matrices aleatorias (en inglés *RMT*, *Random Matrix Theory* [6]). Esta teoría permite distinguir entre sistemas integrales y no integrables mediante el estudio de la estadística de la distribución de los niveles energéticos de un sistema. Mientras que los sistemas clásicamente caóticos presentan espectros cuya estadística de espaciado entre niveles consecutivos siguen una distribución tipo Wigner $P(x) = \frac{\pi x}{2} e^{-\pi x^2/4}$, los sistemas regulares se comportan como si no estuvieran correlacionados y siguen una distribución tipo Poisson, $P(x) = e^{-x}$.

En ese mismo año, Heller [7] vuelve a remarcar la importancia de las órbitas periódicas inestables de los sistemas caóticos en el estudio cuántico de dichos sistemas al poner de manifiesto la existencia de las llamadas cicatrices cuánticas, o en inglés, *scars*, término que utilizaremos preferentemente a lo largo de esta tesis. Los scars son estados estacionarios cuyas distribuciones de probabilidad tienen sus máximos localizados a lo largo de órbitas periódicas inestables. Este fenómeno de localización constituye también una desviación de la ergodicidad perfecta predicha para autoestados caóticos por las distribuciones aleatorias de la RMT [8]. Otras derivaciones de la RMT, como la localización dinámica, desaparecen en el límite semiclásico, pero el fenómeno de scarring sobrevive [8] y además permite explicar muchas propiedades de sistemas clásicamente caóticos, incluyendo estadística de intensidades de funciones de onda, correlaciones de funciones de onda, anchos de resonancia, conductividad de nanoestructuras...

El objetivo principal de esta tesis consiste en el desarrollo y puesta a punto de un nuevo método para la construcción de funciones de scar en sistemas clásicamente caóticos, y su posterior análisis que nos permita establecer relaciones entre la mecánica cuántica de los sistemas y las estructuras clásicas subyacentes. A continuación se presenta su estructura por capítulos, para facilitar su lectura y comprensión.

En el capítulo 2 se lleva a cabo una revisión de la mecánica clásica desde la formulación simpléctica del formalismo hamiltoniano. Analizaremos la estructura del espacio de fases de sistemas integrables y no integrables, para estudiar en estos últimos cómo surge el fenómeno del caos.

En el capítulo 3 se discute el problema de la correspondencia entre los formalismos clásico y cuántico, para centrarnos en la definición del concepto de caos cuántico y en el desarrollo de la disciplina que se encarga de su estudio desde la década los 70 hasta la actualidad. Además se introduce el concepto de función de scar.

En el capítulo 4 se estudia en mayor profundidad la teoría de scars para desarrollar a continuación un nuevo método para su construcción sobre órbitas periódicas inestables de sistemas que presentan un comportamiento parcial o totalmente caótico. El método se basa en llevar a cabo una transformada de Fourier sobre un paquete de ondas forzado a mantenerse centrado en dichas órbitas periódicas. El paquete de ondas centrado en la órbita periódica considerada se obtiene a partir del propagador semiclásico desarrollado por Littlejohn [9] aplicado sobre funciones gaussianas.

En el capítulo 5 se explican las técnicas espectroscópicas que nos van a permitir analizar la dinámica de las funciones de scar que obtendremos con el método desarrollado en el capítulo anterior y establecer relaciones entre la mecánica cuántica y las estructuras clásicas del sistema. A continuación, en el capítulo 6 se introducen las funciones cuánticas de distribución en el espacio de fases que nos permitirán estudiar desde un enfoque adicional la correspondencia clásico-cuántica

En el capítulo 7 se aplica el método desarrollado en el capítulo 3 para la construcción de funciones de scar sobre dos órbitas periódicas del oscilador cuártico. Contrastaremos nuestras funciones con las obtenidas por el método de Polavieja, Borondo y Benito [10] comprobando además la aplicabilidad de nuestro método a casos en los que el método anterior no es capaz de dar resultados válidos. Analizaremos también la dinámica de las funciones de scar obtenidas y la influencia

en la mecánica cuántica de la estructura hiperbólica clásica subyacente, mediante el estudio sus espectros de resolución finita y del espacio de fases a través de la función de distribución de Husimi.

En el capítulo 8 extendemos la construcción de funciones de scar a sistemas moleculares, en particular al sistema LiCN-LiNC, comprobando el amplio margen de aplicabilidad del método de construcción de scars que hemos desarrollado.

Finalmente, en el capítulo 9 recogemos las conclusiones más relevantes del trabajo llevado a cabo en esta tesis.

Capítulo 2

Mecánica clásica

2.1. Formalismo clásico Hamiltoniano. Formulación simpléctica

En esta sección vamos a presentar un breve repaso de la mecánica clásica hamiltoniana e introducir su formulación simpléctica, con el fin de facilitar la comprensión, en el siguiente capítulo de este trabajo, de la construcción de funciones de scar.

El formalismo de Hamilton de la mecánica clásica establece que la descripción de un sistema viene dada por una función de las coordenadas generalizadas \mathbf{q} , de sus momentos conjugados \mathbf{p} , y del tiempo, t . Esta función, $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, recibe el nombre de *Hamiltoniano* del sistema. El estado de un sistema de N grados de libertad queda especificado por $2N$ variables: N coordenadas generalizadas $\mathbf{q} = q_1, q_2, \dots, q_N$ y N momentos generalizados $\mathbf{p} = p_1, p_2, \dots, p_N$. La evolución temporal de estas variables, $\mathbf{q}(t)$ y $\mathbf{p}(t)$ viene dada por las ecuaciones de Hamilton

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde el espacio $2N$ -dimensional generado por las variables (\mathbf{q}, \mathbf{p}) se denomina espacio de fases.

Reformular estas ecuaciones en términos simplécticos consiste en desarrollar un estructura matricial para las ecuaciones del movimiento, de modo que para el sistema anterior de N grados de libertad se construye una matriz columna \mathbf{z} con $2N$

elementos tal que:

$$\begin{aligned} z_i &= q_i & i = 1, 2, \dots, N \\ z_{i+N} &= p_i & i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (2.2)$$

Por ejemplo, para $N = 2$

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

De forma análoga se define una matriz columna $\partial H / \partial \mathbf{z}$ con los elementos

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial z_i} &= \frac{\partial H}{\partial q_i} & i = 1, 2, \dots, N \\ \frac{\partial H}{\partial z_{i+N}} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} & i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (2.4)$$

que determinan la evolución temporal del sistema.

Definimos a continuación \mathbf{J} como la matriz cuadrada de orden $2N$ compuesta por cuatro matrices $N \times N$ de la forma

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

donde \mathbf{I} es la matriz identidad de dimensión $N \times N$. La matriz \mathbf{J} tiene una serie de propiedades interesantes:

1. Su matriz traspuesta es igual a su inversa $\tilde{\mathbf{J}} = \mathbf{J}^{-1}$, y a su vez $\tilde{\mathbf{J}} = -\mathbf{J}$. La matriz \mathbf{J} es, por tanto, antisimétrica.
2. $\tilde{\mathbf{J}}\mathbf{J} = \mathbf{I}$.
3. $\mathbf{J}^2 = -\mathbf{I}$.
4. $|\mathbf{J}| = 1$.

A partir de la definición de \mathbf{J} escribimos las ecuaciones del movimiento de Hamilton de forma compacta. Desde

$$\dot{\mathbf{z}} = \frac{d\mathbf{z}}{dt} \quad (2.6)$$

donde

$$\begin{aligned}\dot{z}_i &= \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{z}_{i+N} &= \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_{i+N}}\end{aligned}\quad (2.7)$$

llegamos finalmente a

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \quad (2.8)$$

que es la expresi3n de las ecuaciones de Hamilton en forma simpl3ctica (t3rmino introducido por Weyl en 1939 [11]). En nuestro ejemplo bidimensional

$$\dot{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{p}_1 \\ \dot{p}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\dot{p}_1 \\ -\dot{p}_2 \\ \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Un sistema hamiltoniano es conservativo si su funci3n hamiltoniana no depende expl3citamente del tiempo. En estos casos se cumple que

$$H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E \quad (2.10)$$

donde E es constante. Esto puede demostrarse f3cilmente derivando la funci3n hamiltoniana respecto al tiempo. As3

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \dot{\mathbf{p}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (2.11)$$

A partir de la ecuaci3n (2.11) vamos a introducir el *corchete de Poisson*, que se define como

$$\{f, H\} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right). \quad (2.12)$$

y en t3rminos de estructura simpl3ctica resulta

$$\{f, H\} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \quad (2.13)$$

Tomando el ejemplo de $N = 1$, se comprueba f3cilmente la ecuaci3n anterior:

$$\begin{aligned}\{f, H\} &= \frac{\partial f}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial q} & \frac{\partial f}{\partial p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q}.\end{aligned}\quad (2.14)$$

En el caso especial para el que sustituimos f por una de las variables canónicas en (2.13), se obtienen las ecuaciones de Hamilton

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= \{q_i, H\} \\ \dot{p}_i &= \{p_i, H\}\end{aligned}\quad (2.15)$$

o en notación simpléctica

$$\dot{\mathbf{z}} = \{\mathbf{z}, H\} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}. \quad (2.16)$$

La evolución temporal de cualquier función $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ en el espacio de fases puede definirse en términos del corchete de Poisson

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \quad (2.17)$$

Si f es una constante del movimiento

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= \{H, f\}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Por tanto, el corchete de Poisson de H con cualquier constante del movimiento debe ser igual a la derivada temporal explícita de la función constante. Si además la constante del movimiento no incluye el tiempo explícitamente

$$\{H, f\} = 0. \quad (2.19)$$

En el caso del sistema conservativo que estudiamos en (2.10) la ecuación (2.17) queda

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \{H, H\} = 0 \quad (2.20)$$

como habíamos comprobado en (2.11)

La estructura de conmutadores en mecánica cuántica guarda gran parecido con la de los corchetes de Poisson. Además se cumple que para una función hamiltoniana cuántica $\hat{H} = \hat{H}(\hat{\mathbf{z}})$ la función hamiltoniana clásica correspondiente es simplemente $H = H(\mathbf{z})$. Sin embargo, no existen reglas únicas para asignar una función hamiltoniana cuántica a un sistema clásico dado.

2.2. Dinámica linealizada y estabilidad de trayectorias

En esta sección vamos a estudiar las ecuaciones que gobiernan el movimiento de trayectorias próximas a una trayectoria de referencia [12, 13]. El conocimiento

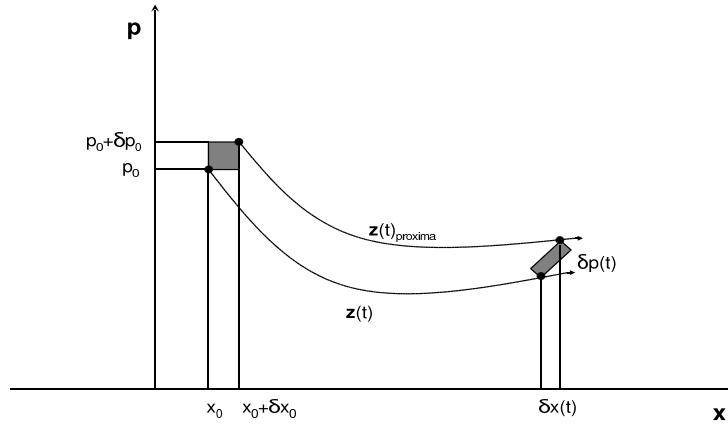


Figura 2.1: Órbita de referencia en el espacio de fases junto con una órbita situada en su proximidad. El área rallada se conserva

de la dinámica de la región que rodea una trayectoria de referencia nos va a permitir obtener del propagador semiclásico a partir del cual obtendremos las funciones de scar. También nos posibilita estudiar la estabilidad de las órbitas periódicas de un sistema y analizar la estructura del espacio de fases en torno a una órbita periódica considerada.

Partimos de unas condiciones iniciales $\mathbf{z}_0 = (\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$ que dan lugar a una órbita de referencia $\mathbf{z}(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$. Para facilitar el desarrollo matemático vamos a tomar $N = 1$, de modo que $\mathbf{z}_0 = (x_0, p_0)$ y $\mathbf{z}(t) = (x(t), p(t))$.

Sea $\delta \mathbf{z}_0$ un desplazamiento de las condiciones iniciales que da lugar en el tiempo a una trayectoria próxima a la órbita de referencia descrita por el desplazamiento $\delta \mathbf{z}(t)$ (ver figura 2.1). Nos disponemos a estudiar este desplazamiento $\delta \mathbf{z}(t)$ a partir de unas ecuaciones del movimiento lineares, obtenidas al linearizar la ecuación (2.8), $\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}$ sobre la órbita de referencia $\mathbf{z}(t)$.

Sean los desplazamientos iniciales

$$\delta \mathbf{z}_0 = \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Estos desplazamientos, transcurrido un tiempo t , se convierten en

$$\delta \mathbf{z}(t) = \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} x(t) &= x(x_0, p_0, t) \\ p(t) &= p(x_0, p_0, t). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Si la trayectoria próxima, $(\tilde{x}(t), \tilde{p}(t))$, se encuentra lo suficientemente cercana a la órbita de referencia, podemos obtenerla a partir de ésta mediante un desarrollo de Taylor truncado a primer orden

$$\begin{aligned} \tilde{x}(t) &= x(t) + \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} \delta x_0 + \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} \delta p_0 \dots \\ \tilde{p}(t) &= p(t) + \frac{\partial p(t)}{\partial x_0} \delta x_0 + \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \delta p_0 \dots \end{aligned} \quad (2.24)$$

Escribiendo $\delta x(t) = \tilde{x}(t) - x(t)$ y $\delta p(t) = \tilde{p}(t) - p(t)$, y reordenando las ecuaciones en forma matricial tenemos

$$\begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

o en forma simpléctica

$$\delta \mathbf{z}(t) = \frac{\partial \mathbf{z}(t)}{\partial \mathbf{z}_0} \delta \mathbf{z}_0 = \mathbf{M} \delta \mathbf{z}_0 \quad \text{con} \quad \mathbf{M}(0) = \mathbf{I} \quad (2.26)$$

donde la matriz \mathbf{M} recibe el nombre de matriz de monodromía o también matriz de estabilidad. La matriz $\mathbf{M}(t)$ es una matriz simpléctica. A continuación vamos a estudiar lo que esto significa.

Sea una transformación lineal homogénea $\mathbf{z}' = \mathbf{S}\mathbf{z}$, se dice que ésta es una transformación canónica si la matriz \mathbf{S} que la define satisface la ecuación

$$\mathbf{S}\mathbf{J}\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{J} \quad (2.27)$$

Las matrices \mathbf{S} que satisfacen esta ecuación se denominan matrices simplécticas [13]. Dado que la evolución temporal de sistemas Hamiltonianos es una transformación canónica [13], la matriz $\mathbf{M}(t)$ es una matriz simpléctica.

Nuestro propósito es encontrar las ecuaciones del movimiento para $\delta \mathbf{z}(t)$, y de forma más general para \mathbf{M} . Para ello obtenemos en primer lugar la derivada temporal de la expresión (2.25)

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

Como $x_0 = x_0(x(t), p(t))$ y $p_0 = p_0(x(t), p(t))$ tenemos

$$\begin{aligned}\frac{d\left(\frac{\partial x(t)}{\partial x_0}\right)}{dt} &= \frac{\partial \dot{x}(t)}{\partial x_0} = \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial H}{\partial p(t)} = \frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial p(t)} \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} + \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \frac{\partial p(t)}{\partial x_0}, \\ \frac{d\left(\frac{\partial x(t)}{\partial p_0}\right)}{dt} &= \frac{\partial \dot{x}(t)}{\partial p_0} = \frac{\partial}{\partial p_0} \frac{\partial H}{\partial p(t)} = \frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial p(t)} \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} + \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \frac{\partial p(t)}{\partial p_0}, \\ \frac{d\left(\frac{\partial p(t)}{\partial x_0}\right)}{dt} &= \frac{\partial \dot{p}(t)}{\partial x_0} = -\frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial H}{\partial x(t)} = -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} - \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial x(t)} \frac{\partial p(t)}{\partial x_0}, \\ \frac{d\left(\frac{\partial p(t)}{\partial p_0}\right)}{dt} &= \frac{\partial \dot{p}(t)}{\partial p_0} = -\frac{\partial}{\partial p_0} \frac{\partial H}{\partial x(t)} = -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} - \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial x(t)} \frac{\partial p(t)}{\partial p_0},\end{aligned}\quad (2.29)$$

que en forma matricial resulta

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial p(t)} & \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial x(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial x(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial x(t)}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p(t)}{\partial x_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial p(t)} & \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial x(t)} \end{pmatrix} \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (2.30)$$

Reordenando y sustituyendo la ecuación (2.25) en la expresión anterior

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial p(t)} = 0 & \frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial p(t)} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial x(t) \partial x(t)} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p(t) \partial x(t)} = 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta p_0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.31)$$

que en forma simpléctica no es otra cosa que

$$\frac{d\delta \mathbf{z}(t)}{dt} = \mathbf{JH}'' \delta \mathbf{z}(t) \quad (2.32)$$

donde \mathbf{H}'' es la matriz hessiana.

Sustituyendo la ecuación (2.26) en (2.32), se obtiene la ecuación del movimiento de $\mathbf{M}(t)$, que es análoga a la correspondiente a $\delta \mathbf{z}(t)$

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbf{JH}'' \mathbf{M}(t) \quad (2.33)$$

En el caso en que el Hamiltoniano sea una función cuadrática de \mathbf{q} y \mathbf{p} , la matriz hessiana \mathbf{H}'' no depende del tiempo, y $\delta \mathbf{z}(t)$ obedece ecuaciones del movimiento

independientes de t . Es el caso, por ejemplo, del oscilador armónico.

Es fácil mostrar que $d|\mathbf{M}(t)|/dt = 0$, y dado que $|\mathbf{M}(0)| = |\mathbf{I}| = 1$, el determinante de la matriz de monodromía es siempre la unidad. Esto significa que el área de la figura (2.1) se mantiene constante. Este resultado es conocido en mecánica cuántica como *teorema de Liouville*.

2.2.1. Estabilidad de órbitas periódicas

Analizar la estabilidad de las órbitas periódicas de un sistema equivale a estudiar cómo se comportan las trayectorias cercanas a dichas órbitas, y esto se puede conocer a partir de los autovalores de la matriz de estabilidad para la órbita periódica en cuestión.

Una órbita periódica es una trayectoria que se cierra sobre sí misma tras un tiempo $t = T$ que recibe el nombre de periodo de la órbita. Este hecho hace que su matriz de estabilidad \mathbf{M} adquiera propiedades especiales muy útiles a la hora de estudiar su estabilidad. Tomamos una órbita periódica γ , en un sistema de dos grados de libertad, $N = 2$. Escogemos el eje y de forma que se sitúe localmente a lo largo de la trayectoria y el eje x perpendicular a él. La matriz de estabilidad \mathbf{M} es de dimensión 4×4 , pero aparece organizada en dos bloques 2×2 . El primer bloque corresponde al movimiento a lo largo de la órbita, $\mathbf{M}^{\parallel}(y, t)$, y el segundo, $\mathbf{M}^{\perp}(y, t)$, al movimiento perpendicular. Para un determinado punto de γ , restringimos el estudio al movimiento en el plano transversal, definido por un valor constante de y y p_y . Los puntos en este plano se caracterizan por un desplazamiento $\delta x = x$, $\delta p_x = p_x - p_x^{\gamma}$, gobernado por la matriz de estabilidad de movimiento perpendicular $\mathbf{M}^{\perp}(y, t)$. Suponemos que la órbita periódica γ tiene periodo T . En general, la matriz de estabilidad $\mathbf{M}^{\perp}(y, T)$ depende del lugar, y , del cual partimos sobre la órbita. Sin embargo, lo que pretendemos es resolver la ecuación (2.33) y obtener los autovalores de $\mathbf{M}^{\perp}(y, T)$, que son los mismos independientemente de dónde partamos en la órbita. Por ello, vamos a escribir a partir de ahora $\mathbf{M}^{\perp}(T)$ para referirnos a la matriz de estabilidad transversal. Si nuestra matriz tiene la forma

$$\mathbf{M}^{\perp}(T) = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

la ecuación que nos permite obtener sus autovalores, η_{\pm} , es

$$\eta_{\pm}^2 - \eta_{\pm}(M_{11} + M_{22}) + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 0. \quad (2.35)$$

Dado que $|\mathbf{M}(T)| = 1$, la expresión (2.35) se convierte en

$$\eta_{\pm}^2 - \eta_{\pm} \text{Tr} \mathbf{M}^{\perp}(T) + 1 = 0 \quad (2.36)$$

cuyas soluciones pueden escribirse como

$$\eta_{\pm} = \frac{1}{2} \left[\text{Tr} \mathbf{M}^{\perp}(T) \pm \sqrt{(\text{Tr} \mathbf{M}^{\perp}(T))^2 - 4} \right]. \quad (2.37)$$

Ahora existen dos posibilidades para los autovalores de $\mathbf{M}^{\perp}(T)$:

- Si $|\mathbf{M}^{\perp}(T)| < 2$, los autovalores son *complejos* y pueden escribirse como

$$\eta_{\pm} = e^{\pm i\omega T} \quad (2.38)$$

que corresponden a *órbitas periódicas estables*.

- Cuando $|\mathbf{M}^{\perp}(T)| > 2$, los autovalores son *reales* y la órbita periódica es *inestable*. En este caso hay dos posibilidades

1.

$$\eta_{\pm} = \left(\eta \quad y \quad \frac{1}{\eta} \right) \quad \text{con} \quad \eta > 0 \quad (2.39)$$

En este caso se habla de órbita hiperbólica, y como en el caso anterior, suele escribirse

$$\eta_{\pm} = e^{\pm \lambda T} \quad (2.40)$$

donde λ es el coeficiente de estabilidad de la órbita.

$$\lambda = \pm \frac{\ln \eta}{T} \quad (2.41)$$

2.

$$\eta_{\pm} = \left(-\eta \quad y \quad -\frac{1}{\eta} \right) \quad \text{con} \quad \eta > 0 \quad (2.42)$$

en cuyo caso se habla de órbita hiperbólica con reflexión

En el régimen caótico, todas las órbitas son de tipo inestables, hiperbólicas o hiperbólicas con reflexión. Los autovectores v_{\pm} de $\mathbf{M}^{\perp}(T)$ obedecen, en el caso hiperbólico

$$\mathbf{M}^{\perp}(T)v_{\pm} = e^{\pm \lambda T} v_{\pm} \quad (2.43)$$

Esto quiere decir que cualquier punto a lo largo de la línea $(x, p_x) = n_c v_+$, donde n_c es una constante de proporcionalidad, permanece en esta línea alejándose exponencialmente de la órbita periódica tras un periodo, convirtiéndose en $n_c e^{\lambda T} v_+$. Esta línea recibe el nombre de *variedad inestable*. De la misma forma, cualquier punto situado sobre la línea $(x, p_x) = n_c v_-$, permanece sobre ella acercándose exponencialmente a la órbita periódica. Se trata de la *variedad estable*. Un punto arbitrario (x, p_x) cerca de la órbita periódica no caerá sobre ninguna de las dos

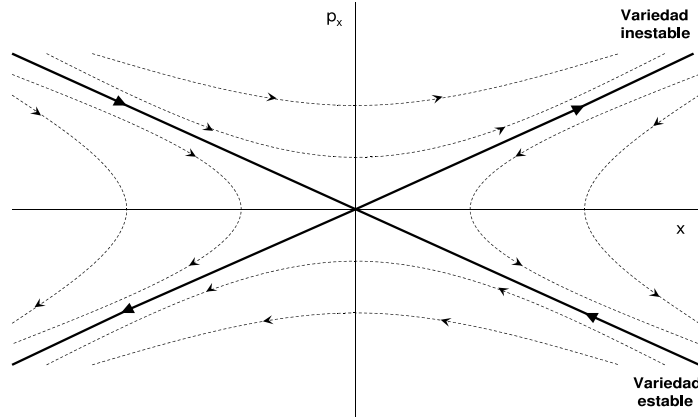


Figura 2.2: Estructura del espacio de fases en torno a un punto fijo hiperbólico. La variedad estable se acerca exponencialmente al punto fijo, mientras que la inestable se aleja exponencialmente de él.

direcciones de forma exclusiva, presentando una componente de cada vector. El movimiento en el plano transversal a la órbita periódica inestable se ilustra en la figura (2.2). En realidad, este plano transversal no es más que la *superficie de sección de Poincaré* linealizada para la que hemos fijado la componente y

$$[x, P_x]_{y_{fijo}, p_y}. \quad (2.44)$$

El concepto de superficie de sección que acabamos de introducir se explica con mayor detalle en la siguiente sección, en la que pasamos a estudiar la estructura del espacio de fases de sistemas Hamiltonianos integrables y no integrables. En estos últimos estudiaremos la aparición del fenómeno del caos.

2.3. Sistemas Hamiltonianos integrables

Un sistema integrable es aquel que puede ser resuelto por cuadraturas; la evolución temporal de sus coordenadas y momentos conjugados se puede expresar mediante integrales. En este caso, el movimiento del sistema es regular.

Un sistema hamiltoniano de N grados de libertad es integrable si existen N funciones $F_i(\mathbf{z}) = F_i(q_1, q_2 \dots q_n, p_1, p_2 \dots p_n)$ independientes en involución que se conservan. Para que esto suceda, sus corchetes de Poisson deben anularse:

$$\{F_i, F_j\} = 0 \quad (i, j = 1, 2 \dots, N) \quad (2.45)$$

Cuando el corchete de Poisson de F_i con la función hamiltoniana se anula (ecuación 2.19) F_i es una constante del movimiento. Para que F_j sea también constante del movimiento, debe cumplirse la ecuación (2.45).

No existen métodos generales para determinar si un sistema clásico es o no integrable. En sistemas de dos grados de libertad se suele recurrir a estudiar la evolución de las trayectorias utilizando la *Superficie de Sección de Poincaré* (SSP). Para la construcción de la SSP a una energía determinada, se fija un valor constante de una de las variables dinámicas de modo que el espacio de fases queda reducido a un plano, la superficie de sección. Por ejemplo, en un sistema con una función hamiltoniana

$$H(\mathbf{z}) = H(q_1, q_2, p_1, p_2) = E \quad (2.46)$$

fijamos $q_2 = \text{constante}$. Esto permite expresar p_2 en función del resto de variables utilizando para ello la energía como parámetro.

$$p_2 = p_2^E(q_1, q_2, p_1). \quad (2.47)$$

La elección de q_2 debe ser adecuada para obtener una superficie que proporcione información relevante de la dinámica del sistema.

De esta forma el espacio de fases se reduce a la superficie de sección $[q_1, p_1]_{E, q_2}$ y se puede extraer gran cantidad de información de una trayectoria estudiando simplemente éste plano. Para sistemas con más de dos grados de libertad la SSP no se podrá representar gráficamente (será $2N - 2$ dimensional con $N > 2$). Sin embargo, se pueden representar proyecciones sobre las $N - 1$ superficies (q_i, p_i) , que elegidas adecuadamente, pueden proporcionar información relevante sobre la dinámica del sistema.

2.3.1. Variables de acción-ángulo

La existencia de constantes del movimiento restringe la región del espacio de fases al que acceden las coordenadas y sus momentos conjugados. Cada constante del movimiento reduce en una unidad la dimensionalidad del espacio de fases. Por tanto, para un sistema con m constantes del movimiento, la dimensión del espacio de fases se reduce a $d = 2N - m$. En el caso de sistemas integrables, tenemos N constantes del movimiento, y por tanto la dimensión del espacio de fases accesible es $d = N$. Entonces, una trayectoria puede explorar como máximo una superficie N -dimensional en el espacio de fases de dimensión $d = 2N$ definido por las variables (\mathbf{p}, \mathbf{q}) . Esta superficie tiene la propiedad matemática de ser una variedad (es continua e infinitamente diferenciable) compacta con la forma de un

toro. En esta variedad N -dimensional se pueden definir las variables de acción-ángulo, mediante una aplicación A ,

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \xrightarrow{A} (\mathbf{\Theta}, \mathbf{I}) \quad (2.48)$$

de modo que la función hamiltoniana inicial dependiente de $2N$ variables se convierte en una nueva función $H(\mathbf{I})$ que depende únicamente de las N variables de acción \mathbf{I} , que se definen como

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}. \quad (2.49)$$

En el trabajo realizado, hemos utilizado de forma exclusiva con las variables (\mathbf{p}, \mathbf{q}) . Sin embargo, para facilitar la comprensión del aspecto del espacio de fases en un sistema integrable, vamos a desarrollar brevemente el formalismo hamiltoniano en las variables de acción-ángulo. En estas nuevas variables, las ecuaciones de Hamilton toman una forma especialmente sencilla

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{\Theta}} &= \frac{\partial H(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{I}} = \omega(\mathbf{I}) \\ \dot{\mathbf{I}} &= -\frac{\partial H(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{\Theta}} = 0. \end{aligned} \quad (2.50)$$

La integración de estas ecuaciones para estudiar la evolución temporal lleva a

$$\begin{aligned} \mathbf{\Theta}(t) &= \mathbf{\Theta}_0 + \omega(\mathbf{I})t, \\ \mathbf{I}(t) &= \mathbf{I}_0. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Las variables de acción permanecen constantes, mientras que las variables de ángulo dependen linealmente del tiempo. Para cada grado de libertad, las variables $(\mathbf{I}, \mathbf{\Theta})$ definen una circunferencias de radios I_i con una frecuencia angular ω_i . La composición de los N movimientos circulares da lugar a un espacio de fases con la estructura de un *toro* N -dimensional invariante frente a la dinámica del sistema. En un sistema de dos grados de libertad se define el número de rotación del toro Ω como el cociente de las dos frecuencias ω_1 y ω_2

$$\Omega = \frac{\omega_1}{\omega_2} \quad (2.52)$$

Si las dos frecuencias se encuentran en resonancia

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{n}{m} \quad n, m \in \mathbb{Z} \quad (2.53)$$

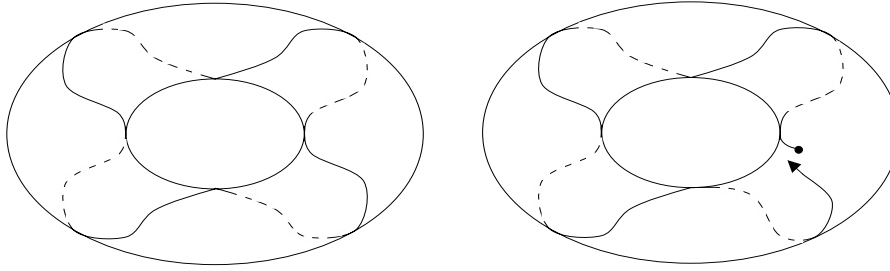


Figura 2.3: *Toros invariantes en un sistema integrable con dos grados de libertad. A la izquierda se presenta una trayectoria cerrada en el interior del toro; el movimiento del sistema es periódico. A la derecha, la trayectoria no se cierra y acabará por cubrir densamente el toro; el movimiento es cuasiperiódico.*

el número de rotación es racional, y la trayectoria se cierra después de dar n vueltas en Θ_1 y m vueltas en Θ_2 . El movimiento es en este caso periódico.

Si el número de rotación es irracional, la trayectoria no se cierra y recorre el toro cubriéndolo densamente a tiempo infinito (figura 2.3). Para un sistema integrable de N grados de libertad la condición de resonancia es la siguiente:

$$\omega \mathbf{L} = 0 \quad (2.54)$$

donde \mathbf{L} es un vector cuyas componentes son números enteros. Si no existe un \mathbf{L} que cumpla esta condición, el movimiento es cuasiperiódico.

A continuación, con el fin de ilustrar el aspecto del espacio de fases de un sistema integrable, vamos a considerar dos ejemplos muy sencillos analíticos: un oscilador armónico unidimensional y un potencial cúbico.

2.3.2. Espacio de fases de un sistema integrable. Sistemas ligados

Para comprender la apariencia del espacio de fases de un sistema integrable ligado, vamos a estudiar un ejemplo muy sencillo y sobradamente conocido: el oscilador armónico unidimensional. Su función hamiltoniana tiene la forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \quad (2.55)$$

Podemos despejar los contornos de energía del sistema obteniendo

$$p^2 + m^2\omega^2 q^2 = 2mE. \quad (2.56)$$

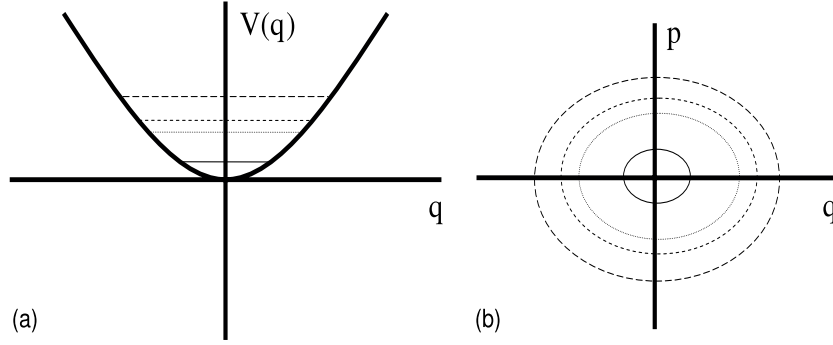


Figura 2.4: *Espacio de fases para un potencial armónico. A la izquierda se representa un potencial armónico con algunos niveles energéticos (a) y a su lado, el espacio de fases correspondiente a dichos niveles (b).*

Por tanto, en el espacio de fases definido como el plano $p - q$ los contornos energéticos son las elipses descritas por la ecuación (2.56) y que pueden observarse en la figura (2.4-b). Como el sistema tiene dimensión $d = 1$ los toros invariantes, también de dimensión $d = 1$, coinciden con estos contornos.

Con el objetivo de entender la estructura del espacio de fases, debemos encontrar los puntos que son invariantes bajo la dinámica, o puntos fijos. Los puntos fijos son los puntos estacionarios del potencial. En ellos se cumple que

$$\frac{\partial V(q)}{\partial q} = 0 \quad (2.57)$$

En este caso, tenemos un punto fijo en el mínimo de potencial, $q = p = 0$. Las órbitas cercanas a este punto permanecen próximas a él en el tiempo, y es por tanto, un punto de equilibrio estable. Estos puntos fijos reciben el nombre de puntos fijos elípticos. En torno al punto fijo encontramos las curvas cerradas invariantes (toros) que corresponden a un movimiento ligado confinado en el pozo de potencial (figuras 2.4-a y 2.4-b). Dos trayectorias del espacio de fases no pueden cortarse. Si se cortaran, ello implicaría que para un conjunto de condiciones iniciales $q(0)$ y $p(0)$ el movimiento podría tener lugar según trayectorias diferentes del espacio de fases, lo cual es imposible puesto que la solución de la ecuación diferencial es única.

Si tomamos un sistema integrable de 2 o más grados de libertad, no podemos estudiar el espacio de fases en su totalidad, sino que debemos recurrir a una superficie de sección de Poincaré representativa. La estructura de la SSP de un sistema ligado va a tener un aspecto muy similar al del espacio de fases de nuestro oscila-

dor modelo: los puntos fijos elípticos de la superficie de sección corresponderán a órbitas periódicas estables (toros racionales) y las órbitas cuasiperiódicas (toros irracionales) generan curvas cerradas invariantes que corresponden a secciones del toro y que la órbita irá rellenando al evolucionar el sistema.

2.3.3. Espacio de fases de un sistema integrable. Sistemas no ligados

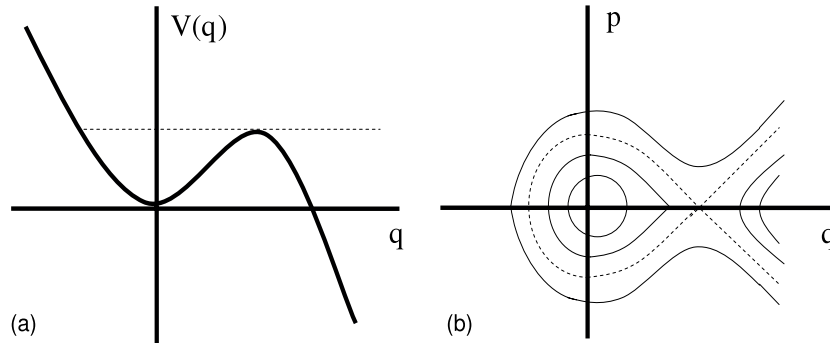


Figura 2.5: *Espacio de fases para un potencial cúbico. A la izquierda se representa un potencial cúbico (a) con la energía correspondiente a la separatriz en línea discontinua, y el espacio de fases correspondiente (b), en el que se puede apreciar la dinámica ligada (curvas cerradas dentro de la separatriz) y la no ligada (curvas abiertas en el exterior de la separatriz.)*

Como ejemplo de sistema no ligado vamos a estudiar un potencial cúbico cuyo potencial tiene la forma (figura 2.5-a)

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - \frac{1}{3}Aq^3 \quad A > 0 \quad (2.58)$$

Para este potencial, se encuentran dos puntos fijos en el espacio de fases

$$\begin{aligned} q_1 &= 0 \\ q_2 &= \frac{m\omega^2}{A} \end{aligned} \quad (2.59)$$

El primero es un punto fijo elíptico, con las mismas características que el que encontramos en el oscilador armónico. Sin embargo, el segundo es lo que llamamos un punto fijo hiperbólico o inestable: las órbitas que se encuentran próximas a él divergen exponencialmente con el tiempo. Estudiando el espacio de fases del sistemas, observamos que en torno al punto fijo elíptico existen toros invariantes que

confinan el movimiento al pozo de potencial. Sin embargo en torno al punto fijo inestable se define la curva

$$E = V(q_2) \quad (2.60)$$

que recibe el nombre de curva separatriz: esta curva, sin estructura toroidal, separa el movimiento ligado del pozo de potencial del movimiento no ligado de órbitas con $E > V(q_2)$, que forman curvas abiertas en el espacio de fases no periódicas. Se trata de trayectorias que provienen de la zona asintótica, golpean la pared de potencial, momento en que $p = 0$, y vuelven a la zona asintótica. Por tanto, la separatriz divide el espacio de fases de un sistema integrable en dos regiones separadas entre las cuales no hay flujo de trayectorias (figura 2.5-b).

2.4. Sistemas Hamiltonianos no integrables. Caos

Un sistema con N grados de libertad ($N > 1$) que no posea N constantes de movimiento es un sistema no integrable. La dinámica de estos sistemas no se restringe a toros y puede resultar muy complicada. La situación de máxima complejidad es aquella para la cual la única constante del movimiento del sistema es la energía. En este caso, una trayectoria a tiempo infinito habrá pasado infinitesimalmente cerca de cualquier punto del espacio de fases energéticamente accesible, habiendo barrido "todo" este espacio. Hemos alcanzado el llamado régimen ergódico, característico de estas condiciones de no integrabilidad extrema. En estas condiciones, aparece el fenómeno del *caos*.

¿Qué es el caos? El caos se define comúnmente a partir de la sensibilidad extrema de un sistema determinista a sus condiciones iniciales. Dos trayectorias cuyas condiciones iniciales $\mathbf{q}(0)$ y $\mathbf{p}(0)$ difieren infinitesimalmente, divergen de modo exponencial, de modo que a un tiempo dado ambas trayectorias no presentan similitud alguna. El exponente de Lyapunov del sistema es el parámetro que mide este efecto de forma cuantitativa, y viene definido por

$$\lambda[\mathbf{q}(0)] = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{d[\mathbf{q}(0), t]}{d[\mathbf{q}(0), 0]} \quad (2.61)$$

donde $d[\mathbf{q}(0), t]$ es la separación de las dos trayectorias a tiempo t y $d[\mathbf{q}(0), 0]$ es la separación infinitesimal inicial entre ambas. Esta expresión es equivalente a la del coeficiente de estabilidad definido en la ecuación (2.40). El exponente de Lyapunov nos da un límite práctico del tiempo máximo para el cual las predicciones sobre la evolución del sistema son válidas, dependiendo de la precisión con la que se midan las condiciones iniciales.

La transición entre un sistema integrable y otro ergódico queda establecida en dos teoremas: el teorema KAM (*Kolmogorov-Arnold-Moser*), conjeturado por Kolmogorov [14] y demostrado por Arnold y Moser [15, 16]; y el teorema de *Poincaré-Birkhoff* [17]. Podemos escribir la función hamiltoniana de un sistema no integrable cualquiera en variables de acción-ángulo como:

$$H(\mathbf{I}, \Theta) = H_0(\mathbf{I}) + \epsilon H_1(\mathbf{I}, \Theta) \quad (2.62)$$

donde \mathbf{I} y Θ continúan siendo coordenadas canónicas, pero no variables de acción ángulo porque H depende explícitamente de Θ , y las acciones no son por tanto constantes del movimiento. Para simplificar las ecuaciones de Hamilton, se puede tomar H_1 periódica en las variables de acción-ángulo originales, es decir, $H_1(\mathbf{I}, \Theta + 2\pi) = H_1(\mathbf{I}, \Theta)$, y así podemos escribir las ecuaciones de Hamilton del sistema como

$$\begin{aligned} \dot{I}_i &= -\epsilon \frac{\partial H_1}{\partial \Theta_i} \\ \dot{\Theta}_i &= \omega_i(\mathbf{I}) + \epsilon \frac{\partial H_1}{\partial I_i} \end{aligned} \quad (2.63)$$

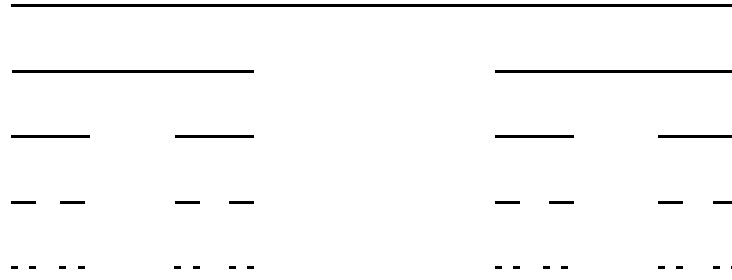
donde $\omega_i = \partial H_0 / \partial I_i$

Pasamos a discutir el significado de la ecuación (2.62). En ella, H_0 es una función hamiltoniana integrable, H_1 es la parte no integrable y ϵ un parámetro que indica el grado de integrabilidad. Para $\epsilon = 0$, el problema se reduce al de un sistema integrable, y el movimiento queda restringido a toros invariantes. Cuando $\epsilon > 0$, el sistema pasa a convertirse en no integrable, y el movimiento deja de reducirse a la superficie definida por estos toros. El teorema KAM recoge las condiciones necesarias y suficientes bajo las cuales un toro no se destruye cuando $\epsilon > 0$, en las coordenadas canónicas definidas. Estas son las siguientes:

1. $\mathbf{n}\omega(\mathbf{I}) \neq 0 \quad \forall \mathbf{n}$ en algún dominio de \mathbf{I}
2. $\exists \quad \partial^k H_1 / \partial \mathbf{I}^k$ para cierto k
3. $|\mathbf{n}\omega(\mathbf{I})| \geq K(\epsilon)|n|^{-\gamma} \quad \forall \mathbf{n}$

donde \mathbf{n} es un vector cuyas componentes son números enteros, ω es el vector de frecuencias definido en la ecuación (2.50), $K(\epsilon)$ es una función complicada con la propiedad límite $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} K(\epsilon) = 0$, y γ es un exponente que depende del número de grados de libertad del sistema.

La primera condición nos dice que todos los toros resonantes, correspondientes

Figura 2.6: *Conjunto de Cantor*

a órbitas periódicas ($\mathbf{n}\omega(\mathbf{I}) = 0$) siempre se destruirán. Sólo las órbitas cuasiperiódicas podrán mantener la estructura toroidal.

La segunda condición implica la suavidad de la parte no integrable del Hamiltoniano.

La tercera condición indica que la no resonancia es condición necesaria pero no suficiente para que el toro no desaparezca. Se requiere además que la relación de frecuencias sea "suficientemente irracional".

Los toros que cumplen estas tres condiciones y que se mantienen sin destruirse reciben el nombre de toros KAM. Estos toros no mantienen su estructura intacta, ya que sufren deformaciones como consecuencia de la perturbación ϵ , pero sí se conserva la estructura topológica toroidal. Al ir aumentando ϵ , ciertos toros dejarán de cumplir la tercera condición y se destruirán. Sin embargo, aunque esto suceda, la destrucción de los toros KAM no es total, sino que se convierten en unas estructuras que presentan topológicamente las características de un conjunto de Cantor, y por ello, reciben el nombre de *cantoros*. En la figura (2.6) se presenta la construcción de un conjunto de Cantor. Se parte de un segmento finito que dividimos en tres nuevos segmentos eliminando el central. Con los dos segmentos restantes, se repite la operación de modo que nos quedan 4 segmentos. Continuando el proceso hasta el infinito, se obtiene un objeto de dimensión no entera $d = \log 2 / \log 3$ que recibe el nombre de fractal.

Para ilustrar numéricamente el proceso de destrucción de los toros KAM en función de la perturbación ϵ vamos a estudiar el llamado *mapa estándar*. Este mapa

esta definido por

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I_n + \epsilon \sin \Theta_n \\ \Theta_{n+1} &= \Theta_n + I_{n+1} \end{aligned} \quad (2.64)$$

donde Θ e I se computan como $\text{mod } 2\pi$, y ϵ es una constante positiva. Para $\epsilon = 0$ el sistema es integrable y el comportamiento del sistema es regular. A medida de que aumenta la perturbación, ϵ , podemos comprobar las consecuencias del teorema KAM. En la figura (2.4) recogemos tres representaciones del mapa para tres valores crecientes de la perturbación ϵ , observando cómo se destruyen la mayoría de los toros y sobreviven únicamente aquellos que cumplen las tres condiciones del teorema KAM

Vamos a estudiar la tercera condición KAM en mayor detalle en sistemas con dos grados de libertad. En este caso la condición toma la forma:

$$\left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{n}{m} \right| \geq \frac{K(\epsilon)}{|m|^{5/2}} \quad \forall m \in \mathbb{N} \quad (2.65)$$

En esta ecuación observamos que cuanto más irracional se la relación de frecuencias ω_1/ω_2 , mayor tendrá que ser la perturbación $K(\epsilon)$ para destruir el toro KAM. Así, para un ϵ pequeño, una fracción finita del espacio de fases está ocupada por movimiento regular, otra fracción finita está ocupada por movimiento caótico y la frontera entre ambas regiones es un fractal. Esta es la situación de muchos sistema Hamiltonianos, de los cuales se dice que presentan un espacio de fases *mixto*. Al aumentar la perturbación acaba desapareciendo todo el movimiento regular y el espacio de fases es completamente caótico. En estos sistemas no existen órbitas periódicas estables [18].

El último toro que desaparece es aquel cuya relación de frecuencias es la llamada proporción áurea σ :

$$\sigma = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \quad (2.66)$$

¿Por qué el toro cuya relación de frecuencias sea esta proporción será el último en destruirse? La teoría de fracciones continuadas permite expresar de una forma muy eficiente un número real μ como cocientes de números enteros. Si el número es racional, la fracción continuada es finita; sin embargo si es irracional, será infinita

$$\mu = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots}}} \quad (2.67)$$

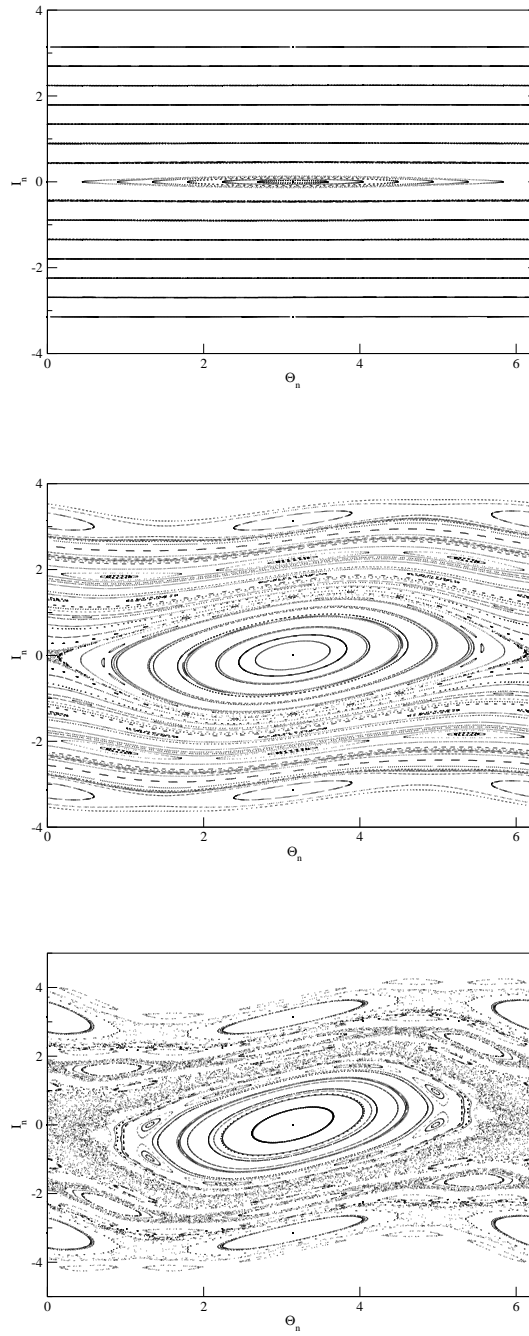


Figura 2.7: Mapa estándar. Arriba: $\epsilon = 0,01$. La perturbación es muy pequeña y la mayoría de los toros permanecen intactos. En la segunda figura: $\epsilon = 0,5$. Al aumentar 50 veces la perturbación, han desaparecido la mayoría de los toros. Abajo: $\epsilon = 1,0$ Únicamente sobreviven los toros KAM con una relación de de frecuencias más irracional.

donde a_0 es un número entero y el resto de a_i son números naturales que se obtienen de la forma siguiente: a_0 es la parte entera de μ , a_1 es la parte entera del inverso de $\mu - a_0$, a_2 la parte entera del inverso del resto de $a_1 \dots$. Truncando la fracción continuada a un cierto orden M se obtiene un número r_M/s_M que es la mejor aproximación racional al irracional μ en el sentido de que no existe ningún racional r/s con $s \leq s_m$ más cercano a μ que r_M/s_M . Por ejemplo, tomando π en fracciones continuadas se tiene

$$\mu = 3 + \frac{1}{7 + \frac{1}{15 + \frac{1}{292 + \dots}}} \quad (2.68)$$

Cuanto más lentamente converge la expresión (2.67) se puede decir que μ es más irracional, y más tardará el toro KAM correspondiente en destruirse. Esta convergencia lenta se produce cuando la sucesión $a_0, a_1, a_2 \dots$ diverge lentamente. La fracción continuada que más lentamente converge es

$$\sigma = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}} \quad (2.69)$$

que corresponde a la proporción áurea (ecuación 2.66).

Hasta aquí, hemos explicado el comportamiento de los toros no resonantes, que pueden mantenerse ante una perturbación ϵ . El caso opuesto, como ya hemos comentado, es el de toros resonantes, correspondientes a órbitas periódicas, que se destruyen ante cualquier perturbación al no cumplir las condiciones del teorema KAM. El proceso de destrucción de estos toros viene descrito por el teorema de Poincaré-Birkhoff, que establece que, para valores suficientemente pequeños de ϵ , a lo largo del antes toro resonante permanecerá un cierto número par de puntos fijos, la mitad de ellos elípticos (estables) y la otra mitad hiperbólicos (inestables). En torno a los puntos elípticos se forman las llamadas islas de estabilidad, existiendo a su vez toros KAM; cantores y antiguos toros resonantes rotos que conservan sus puntos elípticos e hiperbólicos: en torno a estos puntos se repite la estructura hasta el infinito. Este proceso se ilustra en la figura (2.8). En el entorno de los puntos hiperbólicos se producen complicadas trayectorias, denominadas oscilaciones homoclínicas. Este tipo de movimiento da lugar a bandas de estocasticidad. A su vez, el solapamiento de estas bandas al aumentar la perturbación ϵ produce regiones caóticas. Este es el mecanismo de Chirikov [19] para el establecimiento de caos en sistemas conservativos. Así, la destrucción de los toros resonantes provoca la aparición de cadenas de islas de estabilidad que se separan entre sí a través de regiones caóticas.

A continuación analizamos el comportamiento del espacio de fases de los sistemas no integrables conservativos y de sistemas de dispersión.

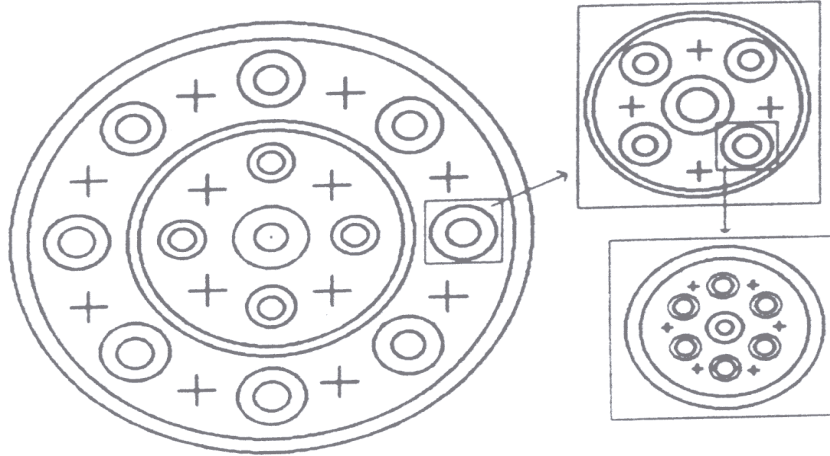


Figura 2.8: Aspecto esquemático del espacio de fases de un sistema no integrable, dado por el teorema de Poincaré-Birkhoff. Los círculos representan curvas cerradas invariantes que encierran a los puntos fijos elípticos. Las cruces representan puntos fijos hiperbólicos.

2.4.1. Sistemas no integrables conservativos ligados

En los sistemas conservativos, el volumen del espacio de fases ocupado por las trayectorias es constante en el tiempo (teorema de Liouville), lo que impide el colapso del movimiento del sistema. El caos en sistemas conservativos genéricos viene caracterizado por el teorema KAM. Entonces, de acuerdo con la discusión anterior, la superficie de sección el espacio de fase de un sistema conservativo no integrable va a presentar zonas con un comportamiento regular, con presencia de puntos fijos y curvas cerradas invariantes en torno a estos puntos fijos, y zonas caóticas. En estas últimas, las trayectorias exploran una variedad $2N - 1$ dimensional cubriendo uniformemente el espacio disponible entre los toros KAM al atravesar la superficie de sección. El origen de este recubrimiento uniforme tiene mucho que ver con lo que les sucede a las vecindades de los puntos fijos hiperbólicos generados por el teorema de Poincaré-Birkhoff: en un punto hiperbólico confluyen dos curvas invariantes, las *variedades estable* e *inestable*, que hemos estudiado en la sección (2.2.1). Hemos estudiado que la variedad estable está compuesta por trayectorias que tienden al punto fijo tras infinitas iteraciones en la superficie de sección. La variedad inestable es una curva formada por trayectorias que infinitas iteraciones atrás se encontraba en el punto fijo, y que ahora se aleja de él. Esta es la idea general, pero en un sistema no integrable, debido a la perturbación ϵ , las variedades estables e inestables se cruzan transversalmente. Las intersecciones de las variedades estables e inestables que proceden del mismo

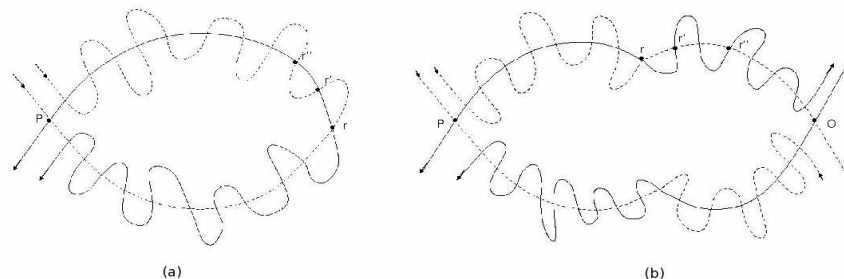


Figura 2.9: *Redes homoclínicas y heteroclínicas esquemáticas. A la izquierda se representa la red homoclínica en torno a un punto hiperbólico P y los puntos homoclínicos r , r' y r'' producidos al intersectarse las variedades estable e inestable. A la derecha aparece la red heteroclínica donde ahora se produce la intersección de las variedades estable e inestable procedentes de dos puntos hiperbólicos diferentes, P y O .*

punto hiperbólico se denominan puntos homoclínicos. Las que proceden de puntos hiperbólicos diferentes reciben el nombre de puntos heteroclínicos (figura 2.9).

Una variedad no puede cortarse nunca a sí misma, puesto que un mismo punto en el espacio de fases daría lugar a dos trayectorias diferentes. Por la misma razón, si las variedades estable e inestable tienen un punto de intersección, la siguiente iteración en la SOS dará lugar a un nuevo punto común a ambas y así sucesivamente. Esto implica que los puntos homoclínicos (o heteroclínicos) dan siempre puntos homoclínicos (heteroclínicos), y además estos son infinitos, ya que tienden al punto fijo hiperbólico tras un número infinito de iteraciones del mapa. Dado que tiene que haber infinitos puntos homoclínicos cada vez más cerca del punto fijo, esto supone que las variedades estable e inestable tienen que oscilar infinitas veces, en lo que se llama mecanismo de pliegue, dando lugar a una estructura muy contorsionada denominada red homoclínica (heteroclínica) que podemos observar en la figura (2.9). Como el mapa de Poincaré es una transformación que preserva el área, el área cerrada por segmentos de una variedad estable e inestable entre dos

puntos homoclínicos consecutivos se conserva tras las iteraciones sucesivas; sin embargo, la distancia entre puntos homoclínicos sucesivos decrece exponencialmente al aproximarnos al punto fijo hiperbólico, lo que supone que la longitud de estos segmentos debe crecer exponencialmente (mecanismo de elongación).

Esta estructura tan compleja aparece a todas las escalas: según el teorema de Poincaré-Birkhoff hay islas de estabilidad producidas por puntos elípticos rodeadas de zonas de caos que no son otra cosa que las redes homoclínicas o heteroclínicas de los puntos hiperbólicos que quedan entre los elípticos.

2.4.2. Sistemas no integrables conservativos no ligados

En nuestro trabajo nos vamos a limitar al estudio de sistemas conservativos ligados, pero para dar una idea global del problema del caos vamos a ilustrar el problema de los sistemas no integrables conservativos no ligados a partir del ejemplo de un potencial cúbico, tomado como un potencial efectivo que evoluciona con el tiempo (figura 2.10). Ahora imaginamos que el potencial describe la interacción entre un átomo y una molécula diatómica (que es un rotor rígido), con lo que puede haber intercambio de energía. rotación-traslación. Cuando el átomo choca con la pared interna del potencial el flujo de energía cinética entre el átomo y el rotor hace que la barrera efectiva suba o baje el canal de salida. Si la barrera se eleva lo suficiente, el átomo puede quedar atrapado por ella, lo que da lugar a la formación de un complejo. Eventualmente, la energía puede ser transferida de nuevo al modo traslacional de modo que el átomo sobrepase la barrera y escape a la zona asintótica. En el espacio de fases esto se refleja en que el punto fijo inestable que se encontraba en la cima de la barrera actúa como atractor y presenta una separatriz rota: sus variedades estable e inestable se cruzan infinitas veces y puede haber flujo de trayectorias de la región asintótica a la región de interacción, ya que la separatriz no es más que una curva invariante. Al segmento de variedad estable e inestable que queda entre el punto fijo y el primer punto homoclínico se le denomina pseudoseparatriz. Esta curva separa el movimiento ligado del no ligado, pero ahora puede existir flujo hamiltoniano entre ellas; cualquier trayectoria que empiece fuera y cruce la pseudoseparatriz quedará atrapada por algún tiempo dentro de la región de interacción del potencial hasta que escape de nuevo a la zona asintótica. Las trayectorias de colisión directa forman curvas abiertas en la superficie de sección que nunca cortan la separatriz. La parte ligada estará compuesta por órbitas periódicas estables e inestables y por redes homoclínicas y heteroclínicas asociadas a estas órbitas inestables, con una estructura análoga a la del caso ligado. La parte de trayectorias atrapadas se puede descomponer a su vez en el conjunto de trayectorias que permanecen un tiempo finito en la región de interacción y aquellas que permanecen por un tiempo infinito. Estas últimas

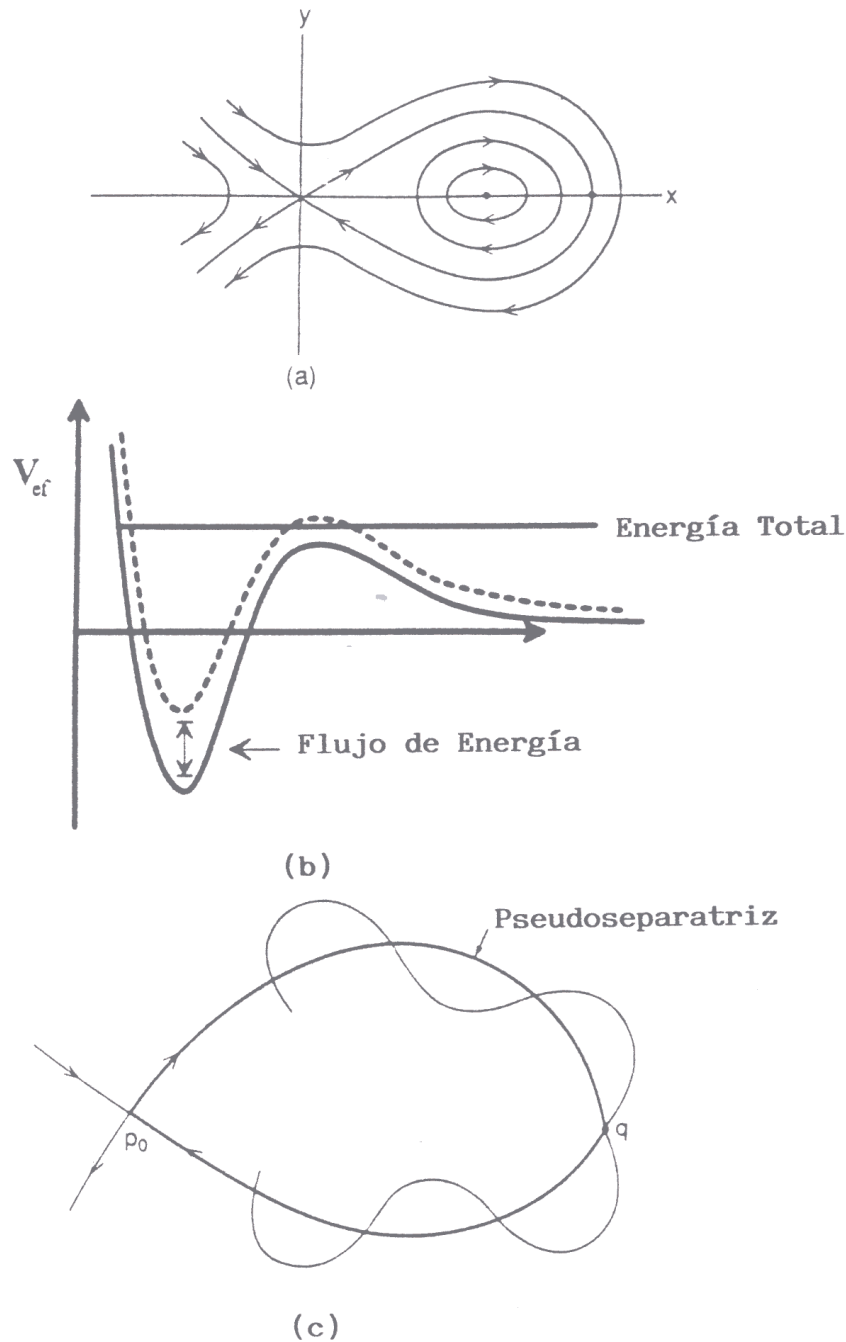


Figura 2.10: Sistema no integrable conservativo no ligado. Si el potencial cúbico en (b) es ahora un potencial efectivo que evoluciona con el tiempo, la separatriz regular en (a) se rompe dando lugar a una red homoclínica originada por las variedades estable e inestable del punto de equilibrio inestable p_0 . La curva cerrada que une p_0 y q en (c) se denomina pseudoseparatriz.

no son más que órbitas homoclínicas generadas por los cruces de las variedades estable e inestable de aquella órbita periódica inestable que separa el movimiento ligado del no ligado. Como los puntos homoclínicos tienden en un tiempo infinito al punto fijo, estas órbitas alcanzarían la zona asintótica sólo en tiempo infinito. Las órbitas homoclínicas constituyen un conjunto invariante de medida cero que además posee las características de un conjunto fractal de Cantor.

2.4.3. Sistemas no integrables disipativos

Los sistemas disipativos están expuestos a la progresiva variación de energía disponible, y el volumen ocupado por las trayectorias en el espacio de fases decrece con el tiempo (el teorema de Liouville no es válido en sistemas disipativos). En estos casos la evolución del sistema queda ligada a una estructura denominada atractor, que puede ser muy compleja. El atractor es la región del espacio de fases hacia la cual convergen las trayectorias posibles dentro del sistema. La sensibilidad a las condiciones iniciales de los sistemas caóticos hace que las trayectorias converjan y diverjan de la zona atractiva inescrutablemente. Además, una trayectoria en el espacio de fase no puede cortarse a sí misma, ya que si así fuese, habría dos curvas diferentes a partir de un mismo punto, lo que implicaría dos realidades simultáneas y diferentes. Una curva de estas características no puede estar contenida en un plano, y además presenta una dimensión fraccionaria. Este es el punto común entre el caos y la condición fractal.

Capítulo 3

Correspondencia clásico-cuántica

3.1. Formalismo cuántico. Sistemas conservativos integrables

El formalismo habitual en mecánica cuántica consiste en utilizar operadores independientes del tiempo que corresponden a los observables del sistema, tales como posición $\hat{\mathbf{Q}}$ o momento $\hat{\mathbf{P}}$. La información sobre la evolución temporal del sistema está enteramente contenida en el vector de estado $|\psi(t)\rangle$ que se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Esta ecuación en la representación de posiciones toma la forma

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p})\langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle \quad (3.1)$$

Hemos definido un sistema hamiltoniano clásico de N grados de libertad como integrable cuando existen N funciones independientes en involución que se conservan, de modo que sus corchetes de Poisson se anulan. De modo análogo, se define un sistema cuántico conservativo integrable de N grados de libertad como aquel para el cual existen N operadores independientes $\hat{F}_i(\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{P}})$ que conmuten

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = 0 \quad (i, j = 1, 2, \dots, N) \quad (3.2)$$

siendo uno de los operadores el propio Hamiltoniano. Existe un teorema que establece que, si se cumple la condición (3.2), se puede hallar una base ortonormal completa de autoestados de los N operadores simultáneamente. Dado que los vectores de esta base son autovectores de los N operadores \hat{F}_i , se podrán denotar por sus correspondientes autovalores f_i . Es decir, $\hat{F}_{i=1}^N$ es un *conjunto completo de observables compatibles*, CCOC y $|f_1 \dots f_N\rangle$ la base ortonormal asociada correspondiente. Para una discusión más completa del papel que desempeñan los CCOC en mecánica cuántica puede consultarse el capítulo X de la referencia [20].

Un problema central en la correspondencia clásico-cuántica ha sido el desarrollo de condiciones de cuantización semiclásicas. En sistemas integrables comenzamos remontándonos a la condición de cuantización semiclásica introducida por Bohr para el átomo de hidrógeno, aplicable para un grado de libertad

$$\oint p dq = 2\pi\hbar n. \quad (3.3)$$

Esta ecuación selecciona únicamente aquellos estados clásicos del sistema para los cuales la integral de la acción es igual a un múltiplo entero de la constante de Planck \hbar . Esta condición se generalizó rápidamente para sistemas de más grados de libertad: primero Epstein [1] en sistemas separables

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar n_i \quad i = 1, \dots, d, \quad (3.4)$$

y más tarde Einstein en sistemas integrables [2]. Einstein comenzaba su desarrollo a partir del trabajo expuesto por Poincaré en el congreso de Solvay de 1911. En un sistema dinámico, $\sum_i p_i dq_i$ es invariante bajo transformaciones de coordenadas, y por tanto la integral $\int \sum_i p_i dq_i = \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ también lo es. Esta integral no es otra cosa que la acción S en mecánica clásica

$$S = S(E, r, r') = \int_0^t L dt' - Et, \quad (3.5)$$

donde L es el Lagrangiano del sistema, E es la energía y r y r' son los puntos inicial y final de una trayectoria evolucionada hasta tiempo t . Como

$$\nabla S = p(r) \quad (3.6)$$

estaríamos tentados a considerar $p(r)$ como el campo de momentos de la trayectoria generado por el gradiente de la función S . Sin embargo, sabemos que la integral de línea entre dos puntos es independiente de la trayectoria seguida entre ellos. Como consecuencia, todas las integrales sobre un circuito cerrado desaparecen.

La función S no es una función unívoca. Sin embargo, en sistemas integrables, S puede considerarse como una función en un toro de dimensión d . En un espacio de estas características, el gradiente de S es unívoco y el campo de momentos de la trayectoria está definido de forma unívoca. La integral $\int \mathbf{p} d\mathbf{q}$ no desaparece para todas las trayectorias cerradas en el toro, sino que d de ellas dan un valor

distinto de 0. Haciendo que estas d integrales estén cuantizadas, se llega a la condición de cuantización del sistema, que no incluye referencias a ningún sistema de coordenadas en particular o a la separabilidad del movimiento.

$$\oint_{C_j} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi\hbar n_i \quad i = 1, \dots, d \quad (3.7)$$

donde $\{C_1, \dots, C_d\}$ es la base de ciclos en el toro con ∇S no nulo.

Más tarde, Keller [4] completó el desarrollo para las condiciones de cuantización semiclásicas, incorporando al concepto de integrabilidad de Einstein la necesidad de corregir el número entero n con un factor extra $\mu_j/4$ que depende de las características del movimiento

$$\oint_{C_j} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu_j}{4} \right). \quad (3.8)$$

μ_j es el llamado índice de Maslov, un invariante topológica del ciclo C_j . En una dimensión, cuenta el número de puntos de retorno que aparecen a lo largo del ciclo. Esta es la llamada condición de cuantización EBK (Einstein-Brillouin-Keller), que puede derivarse a partir de la teoría semiclásica WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) [3, 4] en d grados de libertad. En el apéndice A se encuentra una explicación más detallada la condición EBK y de los índices de Maslov.

El problema surge al intentar cuantizar sistemas no integrables, en los que no está garantizada la existencia de toros invariantes que definan los circuitos C_j . Por tanto, no es posible construir funciones de onda a partir de la teoría WKB y no se puede recurrir a la condición EBK para cuantizar la energía del sistema. Una revisión del problema de la cuantización puede encontrarse en [21].

3.2. Sistemas conservativos no integrables. ¿Caos?

Un sistema con N grados de libertad que no posea N constantes del movimiento, en el sentido de la ecuación (3.2), es un sistema no integrable. Para sistemas conservativos el caso extremo de no integrabilidad se da cuando la única constante del movimiento es el operador hamiltoniano. En mecánica clásica, como hemos visto, la no integrabilidad se traduce en un régimen caótico, cuya característica fundamental es la separación exponencial de trayectorias cercanas (ecuación 2.61). En mecánica cuántica, el concepto de trayectoria deja de tener sentido, y por tanto, hay que buscar otra forma de definir el caos. Una primera aproximación lógica podría ser partir de dos funciones de onda cuánticas diferentes, $|\psi(0)\rangle$ y

$|\phi(0)\rangle$, y medir su separación, $d(t)$, tras un tiempo t siguiendo la evolución sistema a través del operador evolución $\hat{U} \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}$. Sin embargo la linealidad de la ecuación de Schrödinger implica que la evolución de la función de onda es unitaria, y una evolución unitaria conserva el producto escalar en el espacio de Hilbert:

$$d(t) = |\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle|^2 = |\langle\psi(0)|e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}|\phi(0)\rangle|^2 = |\langle\psi(0)|\phi(0)\rangle|^2. \quad (3.9)$$

Por tanto, no es posible definir el caos cuántico a partir de la sensibilidad a condiciones iniciales en la función de onda

Una idea alternativa para caracterizar el caos cuántico, consistente en estudiar la sensibilidad del sistema a perturbaciones en el operador hamiltoniano. Para ello se evoluciona una función de onda inicial con un operador hamiltoniano \hat{H}_0 . Después se vuelve a evolucionar la función obtenida hacia atrás en el tiempo con un hamiltoniano perturbado $\hat{H}_0 + \hat{U}$. El calculo del solapamiento $d(t)$ de esta función con el estado inicial recibe el nombre de *fidelidad o eco de Loschmidt*, en referencia a la correspondencia mantenida por este autor y Boltzmann en relación con el origen la irreversibilidad macroscópica

$$d(t) = |\langle\psi(0)|e^{-i(\hat{H}_0+\hat{U})t/\hbar}e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi(0)\rangle|^2. \quad (3.10)$$

Usando una expansión semiclásica del propagador cuántico, Jalabert y Pastawski derivaron una expresión independiente de la perturbación para el decaimiento de la fidelidad cuántica en el caso de estados iniciales localizados con dinámica clásica caótica, que dependía del exponente de Lyapunov clásico del sistema, estableciendo interesantes relaciones entre el ritmo de decoherencia de un sistema cuántico, y el exponente de Lyapunov de su análogo clásico [22]. Otros estudios semiclásicos han obtenido una expresión exponencial del decaimiento de la fidelidad cuántica dependiente de la perturbación, también llamado decaimiento de Fermi. El resultado más interesante de esta aproximación es que, incrementando la caoticidad del correspondiente sistema clásico, se incrementa la fidelidad cuántica, es decir, mejora la estabilidad de la dinámica cuántica [23]. Para perturbaciones lo suficientemente pequeñas, la fidelidad decae de forma gaussiana.

También se han desarrollado métodos supersimétricos para obtener una expresión para el decaimiento de la fidelidad en modelos RMT [24]. Una revisión reciente sobre este tema puede encontrarse en [25]. En cualquier caso, la posibilidad de definir el caos cuántico rigurosamente a partir de sensibilidad a perturbaciones en el hamiltoniano no está aún suficientemente desarrollada.

Otra característica importante del caos hamiltoniano en sistemas conservativos es la estructura del espacio de fases basada en el teorema KAM (sección 2.4).

En mecánica cuántica, de acuerdo con el principio de indeterminación de Heisenberg, el espacio de fases está discretizado en celdas de volumen h^N , por lo que la frontera fractal entre el movimiento regular y caótico, que caracteriza el caos hamiltoniano, desaparece.

Todas estas aparentes incompatibilidades a la hora de definir el caos cuántico hicieron que los primeros trabajos en este campo despertaran una importante polémica en la comunidad científica. Actualmente, desaparecidas las discrepancias iniciales, se acepta globalmente el caos cuántico como la disciplina que estudia el comportamiento cuántico o semiclásico de sistemas clásicamente caóticos. La mayor parte de la investigación en caos cuántico se ha desarrollado en el límite semiclásico ($2\pi\hbar \rightarrow 0$). Gutzwiller [26, 27, 28, 5] dio un paso fundamental para la utilización de técnicas semiclásicas, permitiendo cuantizar sistemas clásicamente caóticos, que no pueden cuantizarse mediante las reglas de cuantización semiclásicas habituales.

3.2.1. Fórmula traza de Gutzwiller

Para abordar el problema de la cuantización de sistemas clásicamente caóticos, el trabajo de Gutzwiller parte de la traza de la función de Green de un propagador semiclásico. La traza del operador de Green a partir de un propagador cuántico tiene la forma

$$g(E) \equiv \text{Tr}[G(q_0, q, E)] = \int_{\infty}^{\infty} d^N q G(q_0, q, E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n} \quad (3.11)$$

donde $G(q_0, q, E)$ es la función de Green del propagador cuántico que lleva una función de onda concentrada en q_0 a concentrarse en q a tiempo t . N es el número de grados de libertad y E_n el n -ésimo autoestado del Hamiltoniano que gobierna la evolución. Por tanto, la traza proporciona una función de la energía $g(E)$ con discontinuidades infinitas para las autoenergías $E = E_n$. En otras palabras, nos proporciona el espectro de energías.

El nuevo enfoque de Gutzwiller consistió en obtener una aproximación clásica al propagador, calcular su función de Green y obtener el espectro de energías a partir de su traza. Este procedimiento presenta complicaciones técnicas, que lo hacen incluso inaplicable a ciertos sistemas integrables. Sin embargo supuso un avance notable en la cuantización de sistemas no integrables. Gutzwiller obtuvo una ecuación para la traza aplicable a sistemas completamente caóticos, en los que únicamente existen órbitas periódicas hiperbólicas (inestables). La expresión

de Gutzwiller es

$$g(E) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k A_k(E) e^{i\varphi_k(E)} \quad (3.12)$$

donde K se refiere al conjunto de órbitas hiperbólicas del sistema, y la amplitud $A_k(E)$ está relacionada con su estabilidad y periodo. El factor de fase $\varphi_k(E)$ está relacionado con la acción clásica $S_k(E)$ de cada órbita

$$\varphi_k = \frac{S_k(E)}{\hbar} - \mu_k \frac{\pi}{2} \quad (3.13)$$

donde μ_k es el índice de Maslov para la k -ésima órbita periódica hiperbólica. Gutzwiller aplicó esta fórmula de la traza para obtener las energías cuantizadas del problema de Kepler anisotrópico obteniendo un magnífico acuerdo con el espectro cuántico [29].

En aquellos sistemas cuyo comportamiento viene descrito por el teorema KAM, la aplicación del formalismo de Gutzwiller no ha podido llevarse a cabo satisfactoriamente debido, fundamentalmente, a la íntima mezcla en que surgen los distintos tipos de órbitas periódicas y al crecimiento exponencial del número de órbitas con la longitud del periodo. Sí es posible, sin embargo, obtener una expresión análoga a (3.12) para órbitas periódicas elípticas, las cuales tienen interés especial en sistemas con caos suaves ya que dan lugar a las cadenas de islas del teorema de Poincaré-Birkhoff.

Si bien el enfoque de la traza de la función de Green ha tenido poca relevancia debido a su difícil aplicación práctica, tiene gran importancia a orden teórico, ya que se trata del enlace más firme entre mecánica clásica y cuántica para sistemas no integrables. Tras la contribución de Gutzwiller al desarrollo de técnicas semi-clásicas que permitían abordar la relación entre sistemas clásicamente caóticos y sus correspondientes sistemas cuánticos, Bohigas, Giannoni y Schmit [6] comenzaron a aplicar la teoría de matrices aleatorias (*RMT*, *Random Matrix Theory*) a la estadística de autovalores.

3.2.2. Estadística de Autovalores.

La estadística de autovalores estudia la distribución de los autovalores de la ecuación de Schrödinger estacionaria en sistemas dinámicos. En caos cuántico, un resultado fundamental es que la estadística de los niveles de energía de sistemas clásicamente caóticos sigue la distribución de los autovalores de colectividades de matrices aleatorias. Este resultado ha sido el origen fundamental de la disciplina del caos cuántico.

Originalmente, la teoría RMT (*Random Matrix Theory*) fue desarrollada por Wigner en 1951 [30] para explicar fluctuaciones en el espectro de núcleos pesados, que en ese momento era la única parte de la física cuyos resultados experimentales tenían suficiente resolución a energías apropiadas [31]. Más tarde ha sido aplicada con éxito a las propiedades de las fluctuaciones espectrales en átomos y moléculas complejos [32]. Dependiendo de la simetría del sistema debemos considerar una colectividad de matrices aleatorias distintas: la colectividad de matrices ortogonales gaussianas (*Gaussian Orthogonal Ensemble*, o GOE), la colectividad de matrices unitarias gaussianas (*Gaussian Unitary Ensemble*, o GUE) o la colectividad de matrices simplécticas gaussianas (*Gaussian Symplectic Ensemble*, o GSE).

En 1984 [6] Bohigas, Giannoni y Schmit propusieron su famosa conjetura(BGS): "*las fluctuaciones del espectro de sistemas cuánticos invariantes bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K son iguales a las predichas por el GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble)*". El GOE no es otra cosa que el conjunto de matrices aleatorias reales y simétricas invariantes bajo transformaciones ortogonales. Esta conjetura, de la cual aún no se ha alcanzado una demostración rigurosa supone una herramienta fundamental en el estudio de sistemas clásicamente caóticos. Implica que los sistemas completamente caóticos, en los que no existe ningún toro KAM remanente, presentan espectros cuyas estadísticas del espaciado entre niveles siguen una distribución de tipo Wigner, es decir

$$P_W(x) = \frac{\pi x}{2} e^{-\pi x^2/4} \quad (3.14)$$

que es a su vez la función de distribución de espaciado característica de Hamiltonianos de sistemas conservativos formados con elementos de matriz aleatorios. La única restricción es que se trabaja con matrices hermíticas. La figura (3.1) presenta cómo la estadística de espaciado de los niveles de energía de un átomo de hidrógeno sometido a un fuerte campo magnético, que constituye un sistema fuertemente caótico, sigue la distribución de Wigner (3.14). Los sistemas regulares, sin embargo se comportan como si no estuvieran correlacionados, y siguen una distribución de tipo Poisson $P = e^{-x}$ (representada con la curva punteada en la figura (3.1). Este resultado es sorprendente, ya que para un sistema caótico esperaríamos de forma intuitiva una distribución tipo Poisson, con una distribución no correlacionada, caótica de los niveles de energía. En sistemas intermedios correspondientes a sistemas KAM con el espacio de fases mixto, con partes regulares y caóticas, la distribución de autovalores es intermedia entre Wigner y Poisson. Se han desarrollado numerosas distribuciones que interpolan entre los dos casos extremos. Ninguna es completamente satisfactoria a nivel teórico, pero permiten evaluar cuantitativamente el grado de caos en un sistema cuántico. La más utiliza-

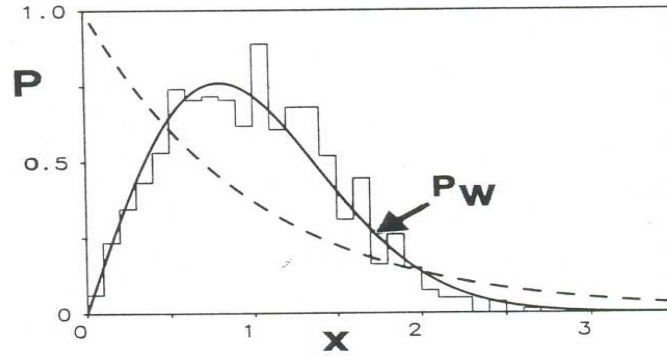


Figura 3.1: Estadística de espaciado de los niveles de energía de un átomo de hidrógeno sometido a un fuerte campo magnético en comparación con la distribución de Wigner para matrices Hamiltonianas aleatorias [35]. La línea de puntos representa la distribución tipo Poisson esperada.

da es la distribución de Brody [33]:

$$P(x, \omega) = \alpha(\omega + 1)x^\omega \exp(-\alpha x^{\omega+1}) \quad \text{con} \quad \alpha = \left(\Omega \left[\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right] \right)^{\omega+1} \quad (3.15)$$

Esta distribución interpola entre el caso regular (Poisson), que corresponde a $\omega = 0$ y el caso totalmente caótico (Wigner), que se corresponde con $\omega = 1$. En realidad, la función de distribución de niveles exacta para el GOE es la distribución de Brody con $\omega = 0,957$ [34]. La distribución de Wigner es sólo una buena aproximación analítica.

En sistemas que no son simétricos bajo inversión temporal el colectivo GOE se reemplaza por el GUE (*Gaussian Unitary Ensemble*), y para simetrías especiales se usa el GSE (*Gaussian Symplectic Ensemble*).

3.2.3. Scars

El estudio de las órbitas periódicas de sistemas clásicamente caóticos resulta ser de una gran utilidad a la hora de trabajar con dichos sistemas a nivel cuántico, como puso de manifiesto Gutzwiller con su fórmula de traza. La relevancia de éstas órbitas periódicas, y en particular de las inestables, se manifiesta en el formalismo cuántico por la aparición de las llamadas *cicatrices cuánticas* o *scars*, que son estados estacionarios cuyas distribuciones de probabilidad tienen sus máximos localizados a lo largo de órbitas periódicas inestables [7].

Como hemos estudiado, en sistemas clásicamente caóticos, los autoestados individuales cubren toda la superficie energética disponible, con fluctuaciones gaussianas no correlacionadas dadas por la teoría de matrices aleatorias (RMT). De hecho, la RMT predice correctamente la mayor parte de la estructura de los autoestados (y también del espectro de autovalores) de estos sistemas. Sin embargo, también sabemos, que la fórmula de traza de Gutzwiller es efectiva en predecir fluctuaciones no aleatorias en el espectro de sistemas clásicamente caóticos. No es de extrañar entonces que las órbitas periódicas inestables del sistema tengan un fuerte efecto en la estructura de ciertos autoestados, modificando las predicciones de la RMT [8]. De hecho, el fenómeno de *scarring* constituye la desviación más importante de la ergodicidad perfecta en autoestados caóticos respecto a la RMT en el límite semiclásico. Otras características de la RMT, como la localización dinámica, desaparecen en el límite $\hbar \rightarrow 0$ mientras que el fenómeno de *scarring* sobrevive. Los scars, junto con efectos de simetría, son suficientes para explicar cuantitativamente muchas propiedades de sistemas clásicamente caóticos, incluyendo estadística de intensidades de funciones de onda, correlaciones de funciones de onda, anchos de resonancia, conductividad de nanoestructuras...

El objetivo principal de este trabajo de tesis consiste en la construcción de funciones de scar en sistemas clásicamente caóticos y el estudio de sus propiedades. En el siguiente capítulo recogemos más extensamente el descubrimiento y desarrollo del estudio de funciones de scar, e introducimos nuestro método para su construcción.

Capítulo 4

Scars. Construcción de funciones de scar

4.1. Introducción

El estudio de las órbitas periódicas de sistemas clásicamente caóticos resulta ser de una gran importancia a la hora de trabajar con dichos sistemas a nivel cuántico, como puso de manifiesto Gutzwiller con su fórmula de traza. La relevancia de estas órbitas periódicas, en particular de las de carácter inestable, se manifiesta en el formalismo cuántico por la aparición del denominado fenómeno *scarring*. La principal característica que define un scar es el incremento significativo respecto a la densidad estadística esperada de la densidad de ciertos autoestados del sistema sobre alguna de sus órbitas periódicas inestables. En castellano se recurre en ocasiones al término *cicatrices cuánticas*, término que refleja la idea de que la mecánica clásica deja una impronta (cicatriz) que surge durante el estudio cuántico del sistema. En este trabajo hemos preferido mantener el término inglés scar.

Desde finales de los años 60 se popularizó el estudio cuántico de sistemas clásicamente caóticos, con el objetivo de encontrar manifestaciones de las estructuras clásicas subyacentes. El problema de sistemas clásicos integrables no reviste tal interés, como indicamos en el capítulo anterior, porque pueden cuantizarse mediante la condición EBK y resolverse mediante la aproximación WKB. Sin embargo no existe una correspondencia análoga entre funciones de onda cuánticas y las órbitas periódicas de un sistema clásicamente ergódico.

La conjetura inicial de Berry [36] sobre los autoestados cuánticos de un sistema clásicamente ergódico establecía que éstos deben estar uniformemente distribuidos sobre la correspondiente hipersuperficie energética en el límite semiclásico

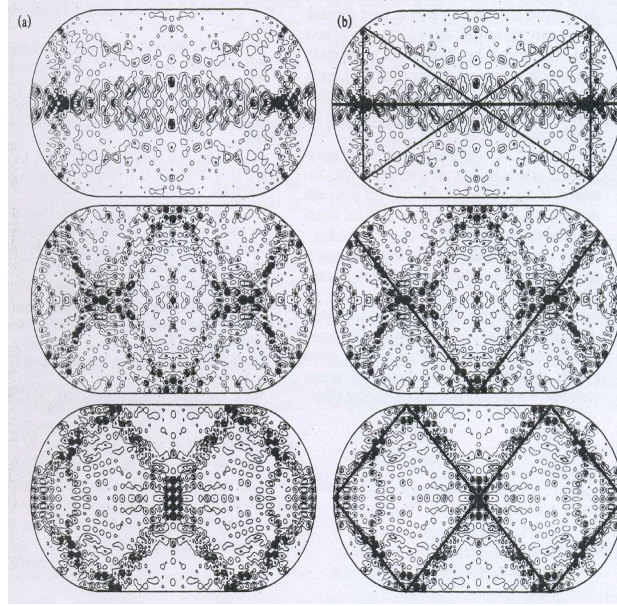


Figura 4.1: *Funciones de scar en el estadio de Bunimovich. A la derecha se superpone la órbita periódica inestable sobre la que se produce el scar.*

$2\pi\hbar \rightarrow 0$. Como una trayectoria de un sistema clásicamente caótico explora a tiempo infinito toda la superficie energéticamente accesible del espacio de fases, parecía lógico pensar que los autoestados cuánticos del sistema cubriesen uniformemente la hipersuperficie energética. Sin embargo, con el desarrollo de la teoría de scars se encuentra que la ergodicidad clásica no garantiza funciones de onda ergódicamente distribuidas en el límite $2\pi\hbar \rightarrow 0$. El fenómeno de scars constituye la desviación más significativa del comportamiento esperado, sobreviviendo en el límite clásico.

La primera evidencia teórica del fenómeno de scars aparece de forma numérica en el trabajo de McDonald y Kaufman [37], pero fue Heller [7] quién lo popularizó entre la comunidad científica y dio una primera explicación teórica: el scarring se define como el incremento o disminución anómalo de densidad de un autoestado sobre o en las cercanías de una órbita periódica inestable del sistema, como se puede observar en la figura (4.1). Las órbitas periódicas estables también atraen densidad cuántica, pero la teoría semiclásica WKB de sistemas integrables, en los cuales sólo existe tipo de órbitas, da una explicación satisfactoria a este hecho.

En el dominio temporal, Heller explica este fenómeno pensando en el scarring como el incremento de la densidad cuántica sobre una órbita periódica inestable originado por la dinámica de un paquete de ondas situado en la cercanía de la órbita, cuyas recurrencias hacen que solape consigo mismo a tiempo largo. Estas recurrencias vienen caracterizadas por la *función de correlación*. La función de correlación $C(t)$ de un paquete de ondas $|\phi(0)\rangle$ centrado en una órbita inestable (q_0, p_0) de un sistema clásicamente caótico se define como

$$C(t) = \langle \phi_{q_0, p_0}(0) | \phi_{q_0, p_0}(t) \rangle \quad (4.1)$$

La función $C(t)$ presenta importantes recurrencias que coinciden con múltiplos enteros del periodo T de la órbita periódica considerada, cuya fuerza disminuye exponencialmente con el tiempo, $\approx e^{-\lambda t/T}$, donde λ es el coeficiente de estabilidad de la órbita. Este fenómeno puede estudiarse también en el dominio de la energía haciendo la transformada de Fourier de $C(t)$ obteniendo el correspondiente espectro $S(E)$. La estructura de recurrencias en $C(t)$ a tiempos cortos da lugar a espectros suavizados con bandas anchas, a partir de las cuales se puede extraer la intensidad media de la función de onda en torno a varias energías. Si λ es pequeño, el espectro presenta bandas separadas aproximadamente por $2\pi\hbar/T$ y con anchos de $\lambda\hbar/T$. En torno a los máximos de las bandas las funciones presentan incrementos de densidad alrededor de la órbita periódica, mientras que lejos de los picos se produce el fenómeno de *antiscarring*: disminución de la densidad respecto a los valores esperados sobre la órbita periódica.

Como resulta evidente de considerar anchos de banda en el espectro, el scarring no puede comprenderse mediante la simple evaluación semiclásica de las densidades de autoestados individuales, ya que requiere tener en cuenta de forma específica los estados cercanos a una determinada órbita periódica. Bogomolny [38], a partir del trabajo de Gutzwiller, introdujo una expresión para la densidad de probabilidad cuántica sobre grupos de autoestados localizados sobre órbitas clásicas. La máxima contribución a la densidad de probabilidad viene dada por aquellos grupos de autovalores situados en un intervalo de energía $E \pm \Delta E$, donde E corresponde a los máximos del espectro obtenido y

$$\Delta E \leq \frac{2\pi\hbar}{T} \quad (4.2)$$

donde T es el periodo de la órbita periódica estudiada. Es importante señalar, que debido al suavizado en torno a un intervalo de energía, se eliminan las posibles contribuciones de órbitas largas.

Basándose en esta idea de Bogomolny, Polavieja, Borondo y Benito [10] desarrollaron un método general de construcción de secuencias de funciones de scar

sobre órbitas periódicas, cada una de las cuales corresponde al incremento de un grado de excitación en el modo representado por la órbita periódica. Los sistemas no integrables no pueden cuantizarse mediante la fórmula EBK, pero las órbitas periódica inestables presentan energías óptimas de scarring en torno a energías EBK [8]. Las funciones de scar se obtienen a partir de combinaciones lineales de autoestados del sistema considerado, obteniendo los coeficientes y el intervalo de energía únicamente a partir de la propagación a tiempos cortos de paquetes de onda situados sobre la órbita periódica. El problema que presenta este método es que el paquete de ondas, al evolucionar, tiende a abandonar órbitas periódicas largas a favor de otras más cortas próximas en el espacio, lo que impide la construcción de funciones de scar sobre órbitas periódicas complejas.

Para explicar el fenómeno de scarring, Heller se basaba en las recurrencias constructivas que la densidad de probabilidad de un paquete de ondas podía completar en condiciones adecuadas, a lo largo de órbitas periódicas de sistemas caóticos a tiempos cortos. Así, la teoría lineal de scarring a tiempos cortos únicamente tiene en cuenta las recurrencias debidas a la órbita periódica. Para tiempo largos, es necesaria una teoría de scarring no lineal, que incluya nuevas recurrencias. Estas recurrencias corresponden a partes del paquete de ondas que abandonan la vecindad de la órbita periódica, viajando por regiones del espacio de fases clásicamente sujetas una dinámica caótica compleja y que acaban volviendo a la cercanía de la órbita periódica (p.e. redes homoclínicas y heteroclínicas). Una construcción semiclásica de funciones de scar que incluyen la influencia de la estructura hiperbólica linearizada en torno a una órbita periódica ha sido desarrollada por Vergini y Carlo [39, 40] y el estudio de la estructura hiperbólica clásica en la construcción de funciones de scar y su influencia en la mecánica cuántica de los sistemas puede encontrarse en [41, 42, 43].

Existe evidencia experimental del fenómeno de scarring. Sridhar [44] y Stein *et al* [45] observaron por primera vez scars de forma directa. Sridhar realizó experimentos en cavidades de microondas con la forma de billares de Sinaí bidimensionales, estableciendo una correspondencia exacta entre las funciones de onda del billar y los modos electromagnéticos en una cavidad con las mismas condiciones de contorno. El trabajo de Stein parte de una idea análoga, pero en este caso se mide la potencia de microondas reflejada por el sistema como función de la energía y de la posición. Posteriormente se han llevado a cabo otros experimentos [46, 47] en heteroestructuras de semiconductores, cuyos patrones de scarring concuerdan bien con las predicciones teóricas. Por último, el trabajo de Doya *et al* [48] ha llevado a observar experimentalmente scars en fibras ópticas.

Todos estos trabajos permiten observar autofunciones cuya densidad se acumu-

la sobre órbitas periódicas cortas inestables, pero no cuantifican la fuerza del scar correspondiente. Esto requeriría obtener datos a frecuencias extremadamente elevadas, para poder probar las predicciones de la teoría de scars sobre la estadística de niveles de sistemas clásicamente caóticos en el límite clásico. Dada la gran dificultad en obtener suficiente cantidad de datos experimentales de calidad a energías muy altas, las simulaciones numéricas en sistemas clásicamente ergódicos ha resultado muy útil a la hora de proporcionar soporte "empírico" al scarring. Una información más detallada sobre la teoría de scars puede consultarse en los reviews de Kaplan y Heller [8, 49].

A continuación vamos a presentar un nuevo método teórico de construcción de funciones de scar, en el cual vamos a retomar la idea de la referencia ([10]), pero en vez de partir de un paquete de ondas centrado sobre una órbita periódica y seguir su libre evolución, construiremos funciones de "tubo" de modo que el paquete de ondas se va a ver obligado a permanecer centrado sobre la órbita estudiada. Esto impide que el paquete se desvíe en su evolución hacia órbitas sencillas, y nos permite construir funciones de scar sobre cualquier órbita periódica de un sistema.

4.2. Construcción de la función de scar

Nuestro método para construir funciones de scar que viven sobre una órbita periódica inestable de un sistema considerado se basa en llevar a cabo una transformada de Fourier sobre un paquete de ondas forzado a mantenerse centrado en la órbita periódica que es objeto del estudio durante un periodo T de la órbita

$$\Psi_E(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt/\hbar} \psi(\mathbf{q}, t) dt \quad (4.3)$$

Si el integrando de la ecuación (4.3) es periódico, la integral (4.3) se convierte en

$$\Psi_E(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt/\hbar} \psi(\mathbf{q}, t) dt = \int_0^T e^{iEt/\hbar} \psi(\mathbf{q}, t) dt \quad (4.4)$$

Para garantizar la periodicidad en el integrando la función $\psi(\mathbf{q}, t)$ debe construirse de modo que presente la misma forma para $\psi(\mathbf{q}, 0)$ y $\psi(\mathbf{q}, T)$, donde T es un periodo de la órbita. El término E , a su vez, debe ser múltiplo de 2π para garantizar la periodicidad, y los valores válidos de E corresponderán por tanto a los valores de la energía cuantizados de acuerdo con la condición EBK (Einstein-Brillouin-Keller) para la órbita periódica. Además, las órbitas periódica inestables presentan energías óptimas de scarring en torno a energías EBK. Incrementando sucesivamente un grado en la excitación, iremos obteniendo una secuencia de funciones

de scar para el sistema. En la sección 3.1 y en el apéndice A hemos estudiado la condición de cuantización EBK y sus condiciones de aplicación.

Una vez definido el valor de E con el que vamos a trabajar, debemos definir el término $\psi(\mathbf{q}, t)$ en la ecuación (4.4), que da la evolución del paquete de ondas centrado en la órbita periódica a lo largo de un periodo a partir de un propagador semiclásico. Nuestro trabajo se basa en el propagador de Littlejohn [9], cuyo desarrollo matemático se muestra a continuación.

4.2.1. Propagador semiclásico para paquetes de onda

En esta sección vamos a proceder al desarrollo de un propagador semiclásico para paquetes de onda. Vamos a comenzar obteniendo un propagador clásico basado en la aproximación de órbitas cercanas para funciones de distribución localizadas sobre una determinada trayectoria, y después vamos a extender el análisis al caso cuántico, estudiando las importantes analogías clásico-cuánticas existentes. A partir del caso cuántico vamos a obtener un propagador semiclásico válido para cualquier paquete de ondas, que aplicaremos a la ecuación (4.4) para obtener las funciones de scar de los sistemas que estudiamos.

Propagador clásico en la aproximación de órbitas cercanas

Sea una función de distribución en el espacio de fases $f(\mathbf{z}, t)$. A $t = 0$, la función de distribución $f_0(\mathbf{z})$ tiene el valor esperado $\langle \mathbf{z} \rangle = \mathbf{z}_0$. Sea \mathbf{z}_0 la condición inicial para una órbita $\mathbf{z}_r(t)$ que tomamos como órbita de referencia. Si $f(\mathbf{z}, 0)$ está localizado en \mathbf{z}_0 , buscamos que la evolución de $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$ siga la órbita de referencia, es decir, que:

$$\langle \mathbf{z} \rangle(t) = \mathbf{z}_r(t). \quad (4.5)$$

Según el teorema de Liouville [13], cualquier función de distribución $f(\mathbf{z}, t)$ permanece constante a lo largo de cualquier trayectoria a lo largo del espacio de fases

$$\frac{df(\mathbf{z}, t)}{dt} = \frac{\partial f(\mathbf{z}, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \cdot \mathbf{J} \frac{\partial H(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} = 0 \quad (4.6)$$

donde $H(\mathbf{z})$ es la función Hamiltoniana clásica. Calculamos ahora la derivada temporal de los valores esperados $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{z} \rangle &= \int \mathbf{z} f(\mathbf{z}, t) d^{2N} \mathbf{z} \\ \frac{d\langle \mathbf{z} \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int \mathbf{z} f(\mathbf{z}, t) d^{2N} \mathbf{z} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Como se desprende de (4.6), $f(\mathbf{z}, t) = - \int \frac{\partial f(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \frac{\partial H(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} dt$, y (4.7) se convierte en

$$\frac{d\langle \mathbf{z} \rangle}{dt} = - \int \mathbf{z} \left(\frac{\partial f(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \frac{\partial H(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \right) d^{2N} \mathbf{z}. \quad (4.8)$$

Integrando por partes llegamos a la expresión

$$\frac{d\langle \mathbf{z} \rangle}{dt} = \mathbf{J} \left\langle \frac{\partial H(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \right\rangle. \quad (4.9)$$

Este resultado es exacto, pero no implica que $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$ siga la órbita de referencia. Durante un periodo de tiempo limitado puede esperarse que si $f(\mathbf{z}, 0)$ está localizado sobre \mathbf{z}_0 , $f(\mathbf{z}, t)$ esté localizado sobre $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$. Esto corresponde a la aproximación de órbitas cercanas (ver Sec. 2.2.1) y ahora podemos expandir $H(\mathbf{z})$ sobre $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$. A segundo orden:

$$H(\mathbf{z}) \sim H(\langle \mathbf{z} \rangle) + (\mathbf{z} - \langle \mathbf{z} \rangle) \frac{\partial H(\langle \mathbf{z} \rangle)}{\partial \mathbf{z}} + \frac{1}{2} (\mathbf{z} - \langle \mathbf{z} \rangle) \frac{\partial H(\langle \mathbf{z} \rangle)}{\partial \mathbf{z}} (\mathbf{z} - \langle \mathbf{z} \rangle) \quad (4.10)$$

Aplicando esta aproximación en la ecuación (4.9) llegamos a

$$\frac{d\langle \mathbf{z} \rangle}{dt} = \mathbf{J} \frac{\partial H(\langle \mathbf{z} \rangle)}{\partial \mathbf{z}} \quad (4.11)$$

cuya solución es $\langle \mathbf{z} \rangle(t) = \mathbf{z}_r(t)$. Ahora los valores esperados clásicos siguen la órbita de referencia.

La órbita de referencia únicamente da información parcial de la evolución temporal de $f(\mathbf{z}, t)$: sabemos que el valor esperado $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$ se mueve a lo largo de la órbita de referencia $\mathbf{z}_r(t)$, pero además la forma y cómo se extiende la función de distribución $f(\mathbf{z}, t)$ respecto a $\mathbf{z}_r(t)$ varían con el tiempo. Este proceso puede concebirse como un rotación simpléctica en el espacio de fases.

Para dar la información completa de la evolución de $f(\mathbf{z}, t)$ en la aproximación de órbitas próximas, vamos a construir un propagador semiclásico a través de tres pasos:

1. se parte de $f(\mathbf{z}, 0)$ localizado sobre \mathbf{z}_0 , y se mueve rígidamente hasta el origen con el operador clásico de traslación $T_{cl}[\mathbf{z}_0]^{-1}$ (figura 4.2-1).
2. se rota ahora $f(\mathbf{z}, t)$ hasta su orientación final mediante la matriz simpléctica $\mathbf{S}(t)$, usando para ello el operador metaplético $\mathbf{R}_{cl}[\mathbf{S}(t)]$ (figura 4.2-2).
3. finalmente se traslada rígidamente $f(\mathbf{z}, t)$ ya rotada hasta su posición final la órbita de referencia $\mathbf{z}_r(t)$ mediante el operador de traslación $T_{cl}[\mathbf{z}_r(t)]$ (figura 4.2-3).

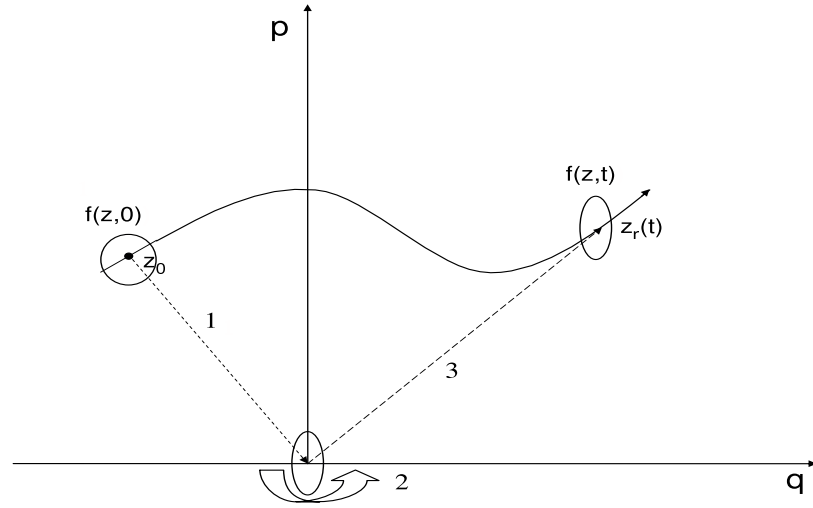


Figura 4.2: Evolución de una función de distribución $f(\mathbf{z}, t)$. 1.- Traslación rígida de $f(\mathbf{z}, 0)$ localizado sobre \mathbf{z}_0 hasta el origen. 2.- Rotación de $f(\mathbf{z}, t)$ hasta su orientación final. 3.- Traslación rígida de $f(\mathbf{z}, t)$ hasta su posición final centrada en $\mathbf{z}_r(t)$

Donde $T_{cl}(\mathbf{z}_0)$ es el operador clásico de translación en el espacio de fases de Heisenberg, cuya desarrollo detallado puede consultarse en el apéndice B

$$\begin{aligned} T_{cl}(\mathbf{z}_0)\mathbf{z} &= \mathbf{z} + \mathbf{z}_0 \\ [T_{cl}(\mathbf{z}_0)f]\mathbf{z} &= f(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) \end{aligned} \quad (4.12)$$

y $\mathbf{R}_{cl}(\mathbf{S}(t))$ es un operador metapléctico que permite el cambio de forma y orientación de $f(\mathbf{z}, t)$ desde su forma inicial hasta la final

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{cl}[\mathbf{S}(t)]\mathbf{z} &= (\mathbf{S}(t))\mathbf{z} \\ \mathbf{R}_{cl}[\mathbf{S}(t)]f(\mathbf{z}) &= \mathbf{R}_{cl}[\mathbf{S}(t)]f\mathbf{z} = f[\mathbf{S}(t)^{-1}\mathbf{z}] \end{aligned} \quad (4.13)$$

Para más información acerca de los operadores metaplécticos puede consultarse el apéndice C.

Combinando los tres operadores, se obtiene el *propagador clásico* $U_{cl}(t, \mathbf{z})$ basado en la aproximación de órbitas cercanas

$$U_{cl}(t, \mathbf{z}) = T_{cl}[\mathbf{z}_r(t)]\mathbf{R}_{cl}[\mathbf{S}(t)]T_{cl}(\mathbf{z}_0)^{-1}. \quad (4.14)$$

Y la evolución temporal aproximada de la función de distribución viene dada por

$$f(\mathbf{z}, t) = [U_{cl}(t, \mathbf{z}_0)f_0](\mathbf{z}) \quad (4.15)$$

o, escribiendo explícitamente la acción de $U_{cl}(t, \mathbf{z}_0)$

$$f(\mathbf{z}, t) = f_0 \mathbf{S}(t)^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{z}_r(t)] + \mathbf{z}_0 \quad (4.16)$$

Es importante tener en cuenta que en todo el proceso no hemos hecho ninguna suposición sobre $f_0(\mathbf{z})$, excepto que debe estar localizada, y además, no estamos expandiendo $f(\mathbf{z}, t)$ sobre $\langle \mathbf{z} \rangle(t)$, sino que hemos expandido únicamente el Hamiltoniano.

Propagador semiclásico

Llevamos ahora a cabo un análisis similar al del apartado anterior para obtener la expresión correspondiente al propagador semiclásico. Sea un estado inicial $|\psi_0\rangle$ con el valor esperado $\langle \hat{\mathbf{z}} \rangle = \mathbf{z}_0$ para $t = 0$. Buscamos soluciones para la ecuación de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$ de la forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)] \mathbf{R}[\mathbf{S}(t)] T(\mathbf{z}_0)^\dagger |\psi_0\rangle \quad (4.17)$$

donde $\mathbf{z}(t)$, $\gamma(t)$ y $\mathbf{S}(t)$ son funciones que todavía debemos determinar. Partimos de las condiciones iniciales

$$\begin{aligned} \gamma(0) &= 0 \\ \mathbf{z}(0) &= \mathbf{z}_0 \\ \mathbf{S} &= \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Para satisfacer estas condiciones, el signo de $\mathbf{R}(\mathbf{S})$ se escoge a tiempo inicial, de modo que

$$\mathbf{R}(\mathbf{I}) = +1 \quad (4.19)$$

y la continuidad determinará el signo de $\mathbf{R}(\mathbf{S}(t))$ durante la evolución temporal. Para poder sustituir la expresión (4.17) en la ecuación de Schrödinger y obtener las expresiones de $\mathbf{z}(t)$, $\gamma(t)$ y $\mathbf{S}(t)$ necesitamos conocer las derivadas temporales del operador de Heisenberg $T(\mathbf{z}(t))$ y del operador metaplético $\mathbf{R}(\mathbf{S}(t))$ ¹. Para la derivada temporal de $T(\mathbf{z}(t))$ hacemos uso de la expresión (B-13) para escribir

$$T(\mathbf{z} + \dot{\mathbf{z}}\Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}\omega(\dot{\mathbf{z}}\Delta t, \mathbf{z})\right] T(\dot{\mathbf{z}}\Delta t) T(\mathbf{z}) \quad (4.20)$$

Además, por la ecuación (B-21) sabemos que

$$T(\dot{\mathbf{z}}\Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\omega(\hat{\mathbf{z}}, \dot{\mathbf{z}}\Delta t)\right]. \quad (4.21)$$

¹Véanse el apéndice B para más detalles del operador de Heisenberg y el apéndice C para operadores metapléticos

Sustituyendo la ecuación (4.21) en (4.20) y expandiendo la exponencial resultante a primer orden llegamos a

$$T(\mathbf{z} + \dot{\mathbf{z}}\Delta t) \sim \left\{ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left[\omega(\hat{\mathbf{z}}, \dot{\mathbf{z}}) + \frac{1}{2}\omega(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) \right] \right\} T(\dot{\mathbf{z}}) \quad (4.22)$$

A partir de esta expresión se puede calcular la derivada temporal de $T(\mathbf{z})$, aplicando la definición de derivada

$$f'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \quad (4.23)$$

y resulta

$$\frac{dT(\mathbf{z})}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\omega(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) + \frac{1}{2}\omega(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) \right] T(\mathbf{z}). \quad (4.24)$$

Tratando de forma similar al operador metaplético para calcular su derivada temporal, escribimos

$$\mathbf{R}(\mathbf{S}(t + \Delta t)) = \mathbf{R}(\mathbf{S} + \Delta t \dot{\mathbf{S}}) = \mathbf{R}((\mathbf{I} + \Delta t \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1})\mathbf{S}) = \mathbf{R}(\mathbf{I} + \Delta t \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1})\mathbf{R}(\mathbf{S}) \quad (4.25)$$

donde hemos usado (C-6) tomando el signo positivo porque el primer factor es cercano a $\mathbf{R}(\mathbf{I})$ y buscamos continuidad. Ahora pasamos a escribir

$$\mathbf{R}(\mathbf{I} + \Delta t \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1}) = \mathbf{R}(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{J} \mathbf{K}) \quad \mathbf{K} \text{ simétrica} \quad (4.26)$$

Lo que implica que

$$\mathbf{K} = \mathbf{J}^{-1} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} = -\mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1}. \quad (4.27)$$

Usando la expresión del operador metaplético correspondiente a un propagador infinitesimal [9]

$$\mathbf{R}(\mathbf{I} + \epsilon \mathbf{J} \mathbf{K}) = 1 - \frac{i\epsilon}{2\hbar} \hat{\mathbf{z}} \mathbf{K} \hat{\mathbf{z}} \quad (4.28)$$

queda

$$\mathbf{R}(\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{J} \mathbf{K}) = 1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \hat{\mathbf{z}} \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} \hat{\mathbf{z}}. \quad (4.29)$$

Sustituyendo la ecuación (4.29) en (4.25) llegamos a

$$\mathbf{R}(\mathbf{S}(t + \Delta t)) = \left(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \hat{\mathbf{z}} \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} \hat{\mathbf{z}} \right) \mathbf{R}(\mathbf{S}). \quad (4.30)$$

y aplicando la definición de derivada (4.23) obtenemos

$$\frac{d\mathbf{R}(\mathbf{S})}{dt} = \frac{i}{2\hbar} \hat{\mathbf{z}} \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} \hat{\mathbf{z}} \mathbf{R}(\mathbf{S}). \quad (4.31)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (4.24) y (4.31) podemos calcular la derivada temporal parcial de la expresión (4.17)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)]\mathbf{R}[\mathbf{S}(t)]T(\mathbf{z}_0)^\dagger|\psi_0\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\dot{\gamma}e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)]\mathbf{R}[\mathbf{S}(t)]T(\mathbf{z}_0)^\dagger|\psi_0\rangle \\
&\quad - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} \left[\omega(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) + \frac{1}{2}\omega(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) \right] T[\mathbf{z}(t)]\mathbf{R}[\mathbf{S}(t)]T(\mathbf{z}_0)^\dagger|\psi_0\rangle \\
&\quad + \frac{i}{2\hbar}e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)]\hat{\mathbf{z}}\mathbf{J}\dot{\mathbf{S}}\mathbf{S}^{-1}\hat{\mathbf{z}}\mathbf{R}[\mathbf{S}(t)]T(\mathbf{z}_0)^\dagger|\psi_0\rangle.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Ahora sustituimos en el segundo término de la ecuación anterior (ver B-11)

$$T[\mathbf{z}(t)]\hat{\mathbf{z}}\mathbf{J}\dot{\mathbf{S}}\mathbf{S}^{-1}\hat{\mathbf{z}} = (\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z})\mathbf{J}\dot{\mathbf{S}}\mathbf{S}^{-1}(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z})T[\mathbf{z}(t)]. \tag{4.33}$$

Como

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)]\mathbf{R}[\mathbf{S}(t)]T(\mathbf{z}_0)^\dagger|\psi_0\rangle \tag{4.34}$$

a partir de (4.32) llegamos a la expresión

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \left[-\dot{\gamma} + \omega(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) + \frac{1}{2}\omega(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) - \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z})\mathbf{J}\dot{\mathbf{S}}\mathbf{S}^{-1}(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}) \right] |\psi(t)\rangle. \tag{4.35}$$

Como sucede en el caso clásico, un estado dependiente del tiempo como el descrito en la ecuación (4.17) no es en general una solución de la ecuación de Schrödinger, a no ser que hagamos uso de la aproximación de las órbitas cercanas. Para que cuánticamente esta aproximación sea intuitiva pensamos en la función de Wigner $W(\mathbf{z}, t)$ centrada sobre $\langle\psi(t)|\hat{\mathbf{z}}|\psi(t)\rangle$. Si $|\psi(t)\rangle$ tiene la forma postulada en (4.17), entonces la función de Wigner $W(\mathbf{z}, t)$ está centrada en el punto $\mathbf{z}(t)$. [9]. Entonces aceptamos que la evolución temporal de la función de Wigner puede aproximarse expandiendo

$$H(\hat{\mathbf{z}}, t) \sim \hat{H}(\mathbf{z}(t)) + (\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}(t))\mathbf{H}'(\mathbf{z}(t)) + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}(t))\mathbf{H}''(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}(t)). \tag{4.36}$$

Combinando las ecuaciones (4.35) y (4.36)² de modo que

$$\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = H|\psi(t)\rangle \tag{4.37}$$

²En la notación de la ecuación (4.36) usamos $H(\mathbf{z})$ y no $\hat{H}(\mathbf{z})$ ya que trabajamos no con el operador hamiltoniano, sino con el símbolo de Weyl del operador hamiltoniano, que coincide con el hamiltoniano clásico [9]

y reagrupando términos en potencias de $(\hat{\mathbf{z}} - \mathbf{z}(t))$ llegamos a las ecuaciones buscadas para $\mathbf{z}(t)$, $\gamma(t)$ y $\mathbf{S}(t)$

$$\dot{\gamma}(t) = \frac{1}{2} \omega(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}}) - H(\mathbf{z}(t)) \quad (4.38)$$

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \mathbf{JH}'[\mathbf{z}(t)] \quad (4.39)$$

$$\dot{\mathbf{S}}(t) = \mathbf{JH}''[\mathbf{S}(t)] \quad (4.40)$$

La primera ecuación es la correspondiente a una fase debido a la no conmutatividad de los operadores de Heisenberg.

$$\gamma(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt (\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}}) - Ht \quad (4.41)$$

donde se asume que el Hamiltoniano no depende explícitamente de t . La dos últimas ecuaciones no son más que las expresiones para la evolución temporal de la órbita clásica y la matriz simpléctica en la aproximación de las órbitas cercanas (ecuaciones 2.33 y 2.8). Ahora podemos escribir nuestro propagador de ondas semiclásico, que es el análogo cuántico del descrito en la ecuación (4.14).

$$U(t, \mathbf{z}_0) = e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)] \mathbf{R}(\mathbf{S}(t)) T(\mathbf{z}_0)^\dagger \quad (4.42)$$

Aparte de la fase, lleva la misma información que el correspondiente clásico, y muestra cómo se puede propagar paquetes de ondas en términos casi puramente clásicos. El paquete de ondas $|\psi_0\rangle$ no tiene por qué ser gaussiano, pero si lo es tenemos la ventaja de poder utilizar fácilmente el operador metaplético. Si $|\psi_0\rangle$ es un estado coherente centrado en \mathbf{z}_0 a tiempo 0, es decir

$$|\psi_0\rangle = T(\mathbf{z}_0)|0\rangle. \quad (4.43)$$

Aplicamos a (4.43) el propagador (4.42) y tenemos

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)] \mathbf{R}[\mathbf{S}(t)] |0\rangle. \quad (4.44)$$

Calculamos su proyección en el espacio x

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | e^{\frac{i\gamma(t)}{\hbar}} T[\mathbf{z}(t)] \mathbf{R}[\mathbf{S}(t)] | 0 \rangle. \quad (4.45)$$

con

$$\langle x | 0 \rangle = \frac{1}{(\pi\hbar)^{N/4}} e^{\frac{-ix}{2\hbar}}. \quad (4.46)$$

Para resolver esta ecuación hacemos uso de [9]

$$\langle x | \mathbf{R}[\mathbf{S}(t)] | 0 \rangle = \frac{1}{(\pi\hbar)^{N/4}} \frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B} + i\mathbf{C}}|} \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \hat{x}(\mathbf{E} - i\mathbf{D})(\mathbf{B} + i\mathbf{C})^{-1} x \right] \quad (4.47)$$

donde $\mathbf{S}(t)$ es una matriz simpléctica

$$\mathbf{S}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{D} & \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

y de la ecuación (B-17)

$$[T[\mathbf{z}(t)]\psi](x) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{1}{2}pq\right)\right]\psi(x - q). \quad (4.49)$$

donde p y q se refieren a una trayectoria de referencia para un grado de libertad como la que estudiábamos en la figura (4.2).

Introduciendo las ecuaciones (4.47) y (4.49) en (4.45) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle x|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{(\pi\hbar)^{N/4}} \frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B} + i\mathbf{C}}|} \\ &\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\left[i\gamma + i\tilde{p}x - \frac{i}{2}\tilde{p}q - \frac{1}{2}(\tilde{x} - \tilde{q})(\mathbf{E} - i\mathbf{D})(\mathbf{B} + i\mathbf{C})^{-1}(x - q)\right]\right\} \end{aligned} \quad (4.50)$$

donde el término $\frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B} + i\mathbf{C}}|}$ contiene la información acerca de la fase topológica, relacionada con la función índice de Maslov: cada vez que $\mathbf{B} + i\mathbf{C}$ toma el valor de -1 la acción clásica sufre una variación de $+\pi/2$.

Cuando el propagador se aplica a estados gaussianos, da lugar a la evolución temporal de la función de onda descrita originalmente por Heller en [50] (ver [51])

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B} + i\mathbf{C}}|} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_t)\mathbf{A}_t(\mathbf{q} - \mathbf{q}_t) + \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_t(\mathbf{q} - \mathbf{q}_t) + \frac{i}{\hbar}\gamma_t\right]. \quad (4.51)$$

donde hemos cambiado la notación de $\mathbf{S}(t)$ por $\mathbf{A}(t)$ para evitar confusiones en la notación de los siguientes capítulos con el término de acción clásica que notaremos como S . Esta expresión (4.51) normalizada y sometida a una serie de aproximaciones que garanticen un integrando periódico es la que utilizaremos en la ecuación (4.4) para obtener nuestra función de scar definitiva a partir de una órbita periódica de referencia $(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t)$ de periodo T . Las expresiones particulares para cada sistema estudiado se recogen en los capítulos 7 y 8 de esta tesis.

Capítulo 5

Espectroscopia

5.1. Formulación dependiente del tiempo de la espectroscopia

La espectroscopia electrónica habitual se basa en *principio de Franck-Condon*, según el cual los electrones realizan rápidas transiciones "verticales" mientras que los núcleos permanecen fijos. Esta aproximación es posible gracias a que la masa de los electrones es mucho menor que la de los núcleos a los que corresponden. Tras la transición electrónica, los núcleos se encuentran alejados de la posición de equilibrio en la nueva superficie de potencial que se ha generado con la transición. Esto da a lugar una evolución de la función nuclear que generalmente no es tenida en cuenta en espectroscopia electrónica, que se limita a explicar el espectro en términos de solapamientos de la función nuclear del estado inicial con un autofunción vibracional independiente del tiempo en el estado electrónico final. Sin embargo, este planteamiento no es adecuado para la obtención de espectros que exploren estados altamente excitados vibracionalmente. La estructura de estos espectros nos interesa especialmente, ya que está condicionada por el régimen (regular o caótico) existente para los estados vibracionales en el rango de energías considerado, y además, la existencia de estados de scar, asociados a órbitas periódicas clásicas, queda reflejada también en la estructura espectral. Por tanto, requerimos un enfoque distinto al habitual para obtener espectros que nos permitan obtener la información que necesitamos para comprender nuestro sistema. Necesitamos una *aproximación dependiente del tiempo de la espectroscopia*, de forma que podamos relacionar espectroscopia y dinámica molecular [52, 53]

Para ilustrar este enfoque consideremos un proceso de fotodisociación. Partimos de un paquete de ondas nuclear localizado en un estado vibracional inicial a $t = 0$. Si se produce una transición electrónica vertical, el paquete de ondas se trasladará

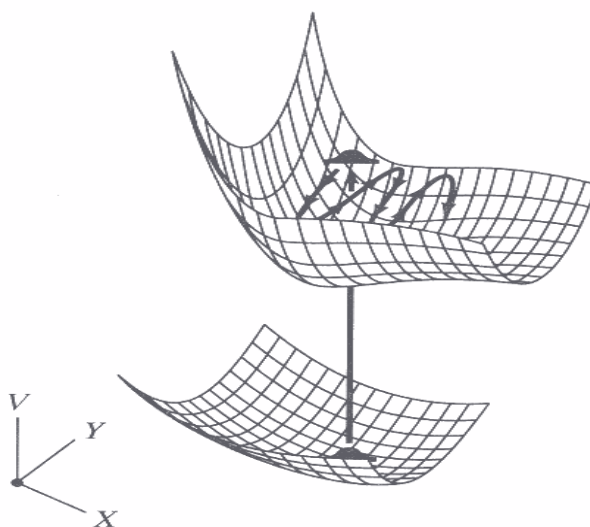


Figura 5.1: *Proceso de fotodisociación. Figura inferior.- Paquete de ondas nuclear localizado en un estado vibracional inicial. Figura superior.- Tras una transición electrónica vertical, se produce la disociación tras un desplazamiento del paquete de ondas sobre la superficie de energía potencial que incluye varias recurrencias.*

por la superficie de potencial correspondiente al estado electrónico superior, alejándose rápidamente del punto de "aterrizaje" por la línea de máxima pendiente. Esto produce un decaimiento de la función de correlación entre el paquete inicial y el paquete evolucionado. A continuación el paquete retorna a la proximidad del punto de partida cada cierto intervalo de tiempo, haciendo que se observen picos resonantes en la función de correlación. Finalmente, de forma más lenta, el movimiento global a lo largo de la coordenada disociativa hace que los picos anteriores tengan cada vez menor intensidad (ver figura 5.1). Si queremos obtener espectros que reflejen este comportamiento, es necesario incluir en ellos la evolución temporal. Para ello vamos a formular nuestros espectros en términos de funciones de correlación.

En nuestro trabajo resulta especialmente importante que durante las primeras oscilaciones el movimiento del centro del paquete seguirá casi exactamente un movimiento clásico, lo que explica la existencia de una relación directa entre las estructuras de baja resolución de los espectros y la dinámica clásica no lineal de los sistemas excitados vibracionalmente, que estudiaremos en los espectros teóricos obtenidos.

Las órbitas periódicas de un sistema clásico caótico y sus propiedades asociadas tienen una especial relevancia en su espectro cuántico. Cada órbita periódica introduce una frecuencia en el espectro de energías asociada a su periodo [54]. La dinámica a lo largo de estas órbitas periódicas introduce recurrencias en la función de correlación, cuya transformada de Fourier da lugar a un espectro suavizado con bandas centradas en las energías cuantizadas EBK de la órbita periódica. Estos resultados se obtienen al considerar la dinámica asociada a la órbita periódica a tiempos cortos, y no tienen en cuenta la influencia del movimiento hiperbólico en torno a la órbita que hemos estudiado en las secciones 2.2.1 y 2.4.1. La existencia de scars implica una regularidad en el correspondiente espectro cuántico, relacionada con el periodo de la órbita periódica. En el dominio temporal, la dinámica de un paquete de ondas que recorre una órbita periódica induce recurrencias en la función de correlación. Al efectuar sobre dicha función de correlación una transformada de Fourier se obtiene un espectro suavizado con picos cuyos anchos son proporcionales al exponente de estabilidad de la órbita, centrados en las energías para las cuales la órbita está cuantizada según la condición EBK. Para tiempos más largos, después del llamado tiempo de Ehrenfest, las recurrencias a lo largo de los circuitos homo y heteroclínicos tienen una influencia fundamental a la hora de estudiar los espectros de resolución finita, o suavizados¹. Wisniacki *et al* [41, 42, 43] han demostrado la existencia de una regularidad espectral adicional originada por el movimiento homoclínico asociado a la órbita periódica a tiempos largos, relacionada con las áreas definidas por las variedades estable e inestable al cruzarse por primera vez. Para descubrir esta regularidad, consideran las fluctuaciones de los anchos de banda espectrales de las funciones de onda localizadas sobre órbitas periódicas inestables (scars) respecto a los esperados en función del periodo y coeficiente de estabilidad de dichas órbitas.

A continuación vamos a estudiar cómo obtener los espectros de resolución infinita e infinita a partir de las funciones de scar que aprendíamos a calcular en el anterior capítulo de esta tesis. Estos espectros se analizarán posteriormente en busca de manifestaciones de la mecánica clásica de los sistemas que constituyen nuestro objeto de estudio.

5.2. Cálculo teórico de espectros

Tras una transición electrónica vertical, el estado no estacionario $|\psi\rangle$ tendrá una evolución temporal compleja, aunque pasado cierto tiempo puede coincidir, al

¹Los términos *espectro suavizado* y *espectro de resolución finita* se utilizarán indistintamente a lo largo de este trabajo

menos de forma aproximada, con su forma inicial. Esta coincidencia indicaría, en el caso de poseer periodicidad, algún tipo de recurrencia cuántica. Esta recurrencia queda descrita de forma cuantitativa por la *función de correlación*. Definimos la función de correlación $C(t)$ como

$$C(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \quad (5.1)$$

donde $|\psi(0)\rangle$ representa el estado no estacionario a $t = 0$, y $|\psi(t)\rangle$ el estado a tiempo t . $C(t)$ puede expresarse en la base de estados estacionarios del sistema. Sean $|n\rangle$ los autoestados para un Hamiltoniano H_0 . La dinámica para un estado inicial arbitrario $|\psi(0)\rangle$ se obtiene como

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \langle n | \psi(0) \rangle. \quad (5.2)$$

donde $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$ es una constante que permitirá la normalización de $C(t)$.

Sustituyendo la ecuación (5.2) en (5.1), y expresando $|\psi(0)\rangle$ en la base de autoestados, $C(t)$ vendrá dada por

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_m \sum_n \langle \psi(0) | m \rangle \langle m | e^{iE_n t/\hbar} | n \rangle \langle n | \psi(0) \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle \psi(0) | n \rangle|^2 e^{iE_n t/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Los coeficientes $\langle \psi(0) | n \rangle$ pueden calcularse sin necesidad de conocer $|\psi(t)\rangle$ y corresponden a los llamados *factores de Franck-Condon*.

El espectro $I(E)$ asociado al estado no estacionario $|\psi\rangle$ viene dado por la transformada de Fourier de la función de correlación (5.3) [53]

$$I(E) = \int dt e^{iEt/\hbar} C(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n | \psi(0) \rangle|^2 \int dt e^{i(E-E_n)t/\hbar}. \quad (5.4)$$

Teniendo en cuenta que

$$\int dt e^{i2\pi(f_2 - f_1)t} = \delta(f_2 - f_1) \quad (5.5)$$

la expresión (5.4) queda

$$I(E) = \sum_n |\langle n | \psi(0) \rangle|^2 \delta(E - E_n). \quad (5.6)$$

Se observa que $I(E)$ corresponde, efectivamente, a la densidad de probabilidad de transición. Así, la probabilidad de transición en el entorno de la autoenergía E_n , viene dado por

$$\int_{E_n-\epsilon}^{E_n+\epsilon} dE \quad I(E) = \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \int_{E_n-\epsilon}^{E_n+\epsilon} dE \delta(E - E_n) = |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \quad (5.7)$$

con ϵ lo suficientemente pequeño, correspondiente al factor de Franck-Condon correcto.

5.3. Espectros de resolución finita

El espectro que hemos definido en la sección anterior, a través de la transformada de Fourier de la función de correlación posee una resolución infinita. En la práctica, un espectro empírico posee una resolución finita, y en nuestro estudio, la posible influencia de la mecánica clásica en el espectro no es observable a resolución infinita.

Los experimentos permiten obtener espectros empíricos para tiempos limitados, lo cual da lugar a una resolución finita y a la aparición de bandas en lugar de picos en el espectro. Este efecto puede describirse teóricamente introduciendo una *ventana temporal* $W_\Delta(t)$ con una anchura característica Δt en el espectro (5.4), convirtiéndolo en un espectro de resolución finita $I_\Delta(E)$, esto es

$$I_\Delta(E) = \int dt e^{iEt/\hbar} C_\Delta(t) = \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{i(E-E_n)t/\hbar} W_\Delta(t). \quad (5.8)$$

La ventana $W_\Delta(t)$ ha de poseer la propiedad de estar centrada en $t = 0$. Existen diversas formas válidas para la ventana, y a continuación se discuten algunas de las más utilizadas. Además, para el espectro de resolución finita podemos obtener la expresión de la función de banda asociada aplicando la ventana temporal $W_\Delta(t)$ a la ecuación (5.2) y calculando su transformada de Fourier

$$\begin{aligned} |\Psi_E\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dt W_\Delta(t) e^{iEt/\hbar} |\psi(t)\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dt W_\Delta(t) e^{iEt/\hbar} \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \langle n|\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (5.9)$$

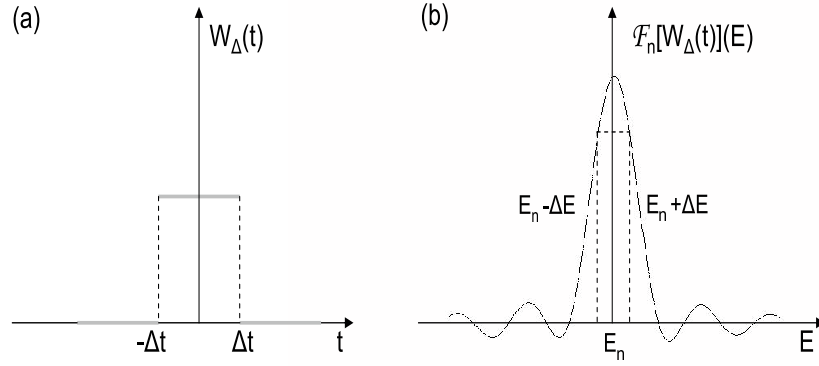


Figura 5.2: Ventana temporal para un pulso cuadrado (a) y su correspondiente transformada de Fourier (b).

5.3.1. Ventana temporal dada por un pulso rectangular

Sea una ventana temporal dada por un pulso rectangular

$$W_\Delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < -\Delta t \\ 1 & \text{si } -\Delta t \leq t \leq \Delta t \\ 0 & \text{si } \Delta t < t \end{cases} \quad (5.10)$$

donde Δt determina la anchura de la ventana. Introduciendo la expresión (5.10) en (5.8) llegamos a

$$\begin{aligned} I_\Delta(E) &= \int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt e^{iEt/\hbar} C(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \int_{-\Delta t}^{\Delta t} e^{i(E-E_n)t/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \left[\int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt \cos(E-E_n)t/\hbar + i \int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt \sin(E-E_n)t/\hbar \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \frac{\text{sen}[(E-E_n)\Delta t/\hbar]}{(E-E_n)} \end{aligned} \quad (5.11)$$

En la figura (5.2) se muestra un pulso rectangular y su transformada de Fourier. Asumiendo la relación de incertidumbre $\Delta t \Delta E = \hbar$, el espectro de resolución finita resultante es

$$I_\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \frac{\text{sen}[(E-E_n)/\Delta E]}{(E-E_n)} \quad (5.12)$$

donde la anchura ΔE caracteriza la anchura de la banda. La función transformada toma valores negativos, y por tanto, no podemos considerarla un densidad de probabilidad. El uso de una aproximación tan drástica, como es el pulso cuadrado, es

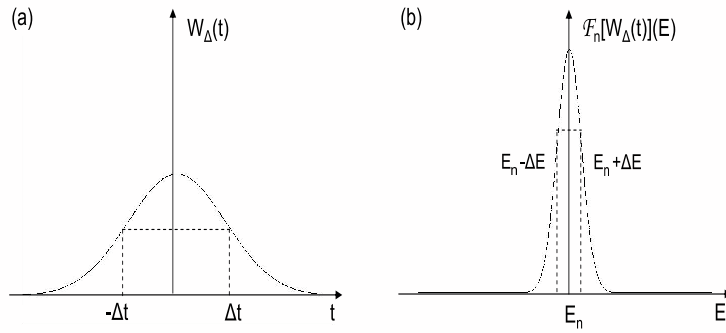


Figura 5.3: Ventana temporal gaussiana (a) y su correspondiente transformada de Fourier (b).

responsable de esta anomalía. No obstante, en el límite $\Delta E \rightarrow 0$ la transformada cumple la propiedad de tender a $\delta(E - E_n)$ (el espectro de resolución infinita).

5.3.2. Ventana temporal gaussiana

Consideramos una ventana temporal gaussiana

$$W_\Delta(t) = e^{-t^2/2(\Delta t)^2} \quad (5.13)$$

donde Δt es la anchura de la ventana. Introducimos la expresión (5.13) en (5.8) e integramos

$$\begin{aligned} I_\Delta(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-t^2/2(\Delta t)^2} e^{iEt/\hbar} C(t) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-t^2/2(\Delta t)^2} e^{i(E-E_n)t/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 e^{-(E-E_n)^2(\Delta t)^2/2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-[t/\Delta t + i(E-E_n)/\hbar]^2/2} \end{aligned} \quad (5.14)$$

haciendo un cambio de variable $z = -t/\Delta t + i(E - E_n)/\hbar$ y teniendo en cuenta que $\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2} = \sqrt{\pi/a}$ con $(dt = \Delta t dz)$

$$\begin{aligned}
 I_{\Delta}(E) &= \frac{\Delta t}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 e^{-(E-E_n)^2(\Delta t)^2/2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-z^2/2} = \\
 &= \frac{\Delta t}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 e^{-(E-E_n)^2(\Delta t)^2/2\hbar^2} \sqrt{2\pi} \\
 &= \frac{\Delta t}{(2\pi)^{1/2}\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 e^{-(E-E_n)^2(\Delta t)^2/2\hbar^2}
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

Hemos observado que la transformada de Fourier de una función gaussiana es otra función gaussiana, pero con una anchura inversamente proporcional a la anchura primitiva (figuras 5.3-(a) y (b)). Asumiendo la relación $\Delta t \Delta E = \hbar$ entre ambas anchuras, la expresión (5.15) queda

$$I_{\Delta}(E) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\Delta E} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 e^{-(E-E_n)^2/2(\Delta E)^2} \tag{5.16}$$

donde ΔE determina la anchura del espectro, que queda formado por una suma de funciones gaussianas normalizadas constituyendo la densidad de probabilidad de transición. Al igual que en el pulso cuadrado se cumple que en el límite $\Delta E \rightarrow 0$ la transformada tiende a $\delta(E - E_n)$.

5.3.3. Pulso sinusoidal

Tomamos ahora una ventana temporal dada por un pulso sinusoidal

$$W_{\Delta}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < -\Delta t \\ \cos\left(\frac{t\pi}{2\Delta t}\right) & \text{si } -\Delta t \leq t \leq \Delta t \\ 0 & \text{si } \Delta t < t \end{cases} \tag{5.17}$$

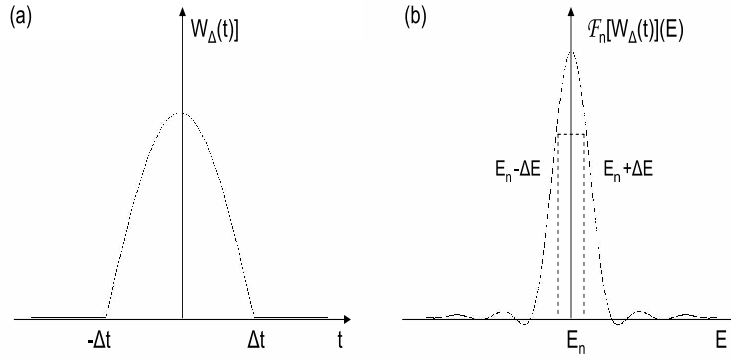


Figura 5.4: Ventana temporal para un pulso sinusoidal (a) y su correspondiente transformada de Fourier (b).

donde Δt es la anchura de la ventana. Como en los casos anteriores, introducimos la expresión (5.17) en (5.8) e integramos

$$\begin{aligned}
 I_{\Delta}(E) &= \int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt \cos\left(\frac{t\pi}{2\Delta t}\right) e^{iEt/\hbar} C(t) \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt \cos\left(\frac{t\pi}{2\Delta t}\right) e^{i(E-E_n)t/\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \int_{-\Delta t}^{\Delta t} dt \frac{e^{it\pi/2\Delta t} + e^{-it\pi/2\Delta t}}{2} e^{i(E-E_n)t/\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \left\{ \frac{e^{it[(E-E_n)/\hbar + \pi/2\Delta t]}}{2i[\pi/2\Delta t + (E-E_n)/\hbar]} + \frac{e^{it[(E-E_n)/\hbar - \pi/2\Delta t]}}{-2i[\pi/2\Delta t - (E-E_n)/\hbar]} \right\}_{-\Delta t}^{\Delta t} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \left\{ \frac{ie^{i\Delta t(E-E_n)/\hbar} + ie^{-i\Delta t(E-E_n)/\hbar}}{2i[\pi/2\Delta t + (E-E_n)/\hbar]} + \frac{-ie^{i\Delta t(E-E_n)/\hbar} - ie^{-i\Delta t(E-E_n)/\hbar}}{-2i[\pi/2\Delta t - (E-E_n)/\hbar]} \right\} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \left\{ \frac{1}{[\pi/2\Delta t + (E-E_n)/\hbar]} + \frac{1}{[\pi/2\Delta t - (E-E_n)/\hbar]} \right\} \cos[\Delta t(E-E_n)/\hbar] \\
 &= \frac{1}{2\hbar\Delta t} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \frac{\cos[\Delta t(E-E_n)/\hbar]}{(\pi/2\Delta t)^2 - [(E-E_n)/\hbar]^2}
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

La transformada de Fourier de un pulso sinusoidal se observa en la figura (5.4). Si sustituimos en (5.18) $\Delta t = \hbar/\Delta E$ queda

$$I_{\Delta}(E) = \frac{\Delta E}{2\hbar^2} \sum_n |\langle n|\psi(0)\rangle|^2 \frac{\cos[(E-E_n)/\Delta E]}{(\pi\Delta E/2\hbar)^2 - [(E-E_n)/\hbar]^2} \tag{5.19}$$

donde como es sabido ΔE determina la anchura del espectro, y en el límite $\Delta E \rightarrow 0$ la transformada tiende a $\delta(E - E_n)$.

5.3.4. Estados cuánticos asociados

Para un espectro de resolución infinita

$$I(E) = \sum_n |\langle n | \psi(0) \rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (5.20)$$

la función asociada a cada pico es, obviamente, la del correspondiente estado estacionario de energía E_n . Sin embargo, en la función de onda asociada a una banda contribuyen, siendo rigurosos, todos los estados estacionarios. Pero la contribución de cada estado esta determinada por los factores de Franck-Condon y por la transformada de Fourier de la ventana temporal $W_\Delta(t)$ aplicada sobre la función de correlación $C(t)$, de manera que únicamente los estados estacionarios cuya energía esté cercana a la de la banda tendrán una contribución significativa.

5.3.5. Determinación de los anchos de banda en el espectro suavizado

Cada banda de un espectro de resolución finita está centrada a una energía E determinada, y presenta un ancho característico. El ancho de la banda viene dado por la expresión

$$\sigma_E = \sqrt{\sum_n |\langle n | \Psi_E \rangle|^2 (E - E_n)^2} \quad (5.21)$$

con $|\Psi_E\rangle$ definido en la ecuación (5.9). Tomando como ejemplo el espectro finito para un pulso sinusoidal, la expresión (5.21) queda de la forma

$$\begin{aligned} \sigma_E &= \sqrt{\left| \frac{1}{(2\Delta t \hbar)^{1/2}} \sum_n \langle n | n \rangle \langle n | \psi(0) \rangle \frac{\cos[\Delta t(E - E_n)/\hbar]}{(\pi/2\Delta t)^2 - [(E - E_n)/\hbar]^2} \right|^2 (E - E_n)^2} \\ &= \sqrt{\sum_n |I_\Delta(E)|^2 (E - E_n)^2}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Esta última ecuación es válida para cualquier ventana temporal $W_\Delta(t)$.

Capítulo 6

Funciones de distribución en el espacio de fases

6.1. Introducción

La formulación en el espacio de fases de la mecánica cuántica tiene sus orígenes en el trabajo clásico de Wigner [55], en el que introduce la función de distribución en el espacio de fases que lleva su nombre como herramienta para introducir correcciones cuánticas en la mecánica estadística. Esta formulación ofrece un marco en el que los fenómenos cuánticos pueden describirse utilizando un lenguaje lo más parecido posible al clásico, y permite un acercamiento a ciertos problemas, como la correspondencia clásico-cuántica, difícil de alcanzar mediante otras aproximaciones. Además, implica trabajar sin operadores, lo que en ocasiones constituye una ventaja práctica importante. Esto explica la popularidad de la formulación en el espacio de fases en muchas áreas de la física, incluyendo la física no lineal [56, 57].

La herramienta principal de la formulación en el espacio de fases de la mecánica cuántica son las funciones de distribución en el espacio de fases, de las cuales la más conocida sea quizá la función de distribución de Wigner. No existe una forma única de definir una función de distribución en el espacio de fases cuántico. El concepto de una probabilidad conjunta (\mathbf{q}, \mathbf{p}) en un punto en el espacio de fases no está "permitido" en mecánica cuántica, si se tiene en cuenta de principio de incertidumbre de Heisenberg. Por tanto, estas funciones de distribución deben considerarse como herramientas matemáticas que facilitan cálculos cuánticos, o como funciones de *cuasiprobabilidad* que proporcionan una descripción correcta de cantidades observables.

La elección de una determinada función de distribución u otra es una cuestión de conveniencia, y en algunos casos, incluso de necesidad. En ciertos casos, obtener una descripción adecuada de un problema o no depende de está elección. En la descripción de sistemas cuánticos clásicamente caóticos, su evolución temporal puede estudiarse mediante representaciones de contornos de una función de distribución. La dificultad radica en el hecho de que las representaciones en espacio de fases de la evolución de sistemas clásicamente caóticos son extremadamente complejas y resulta difícil obtener información práctica de ellas. Esto sucede, por ejemplo con la función de distribución de Wigner. Entre las distintas funciones de distribución, la función de Husimi se comporta de forma regular y presenta la estructura más sencilla y suave. Por ello es la más utilizada en el estudio dinámico cuántico de sistemas clásicamente caóticos.

A continuación se procede a un desarrollo de la teoría de las funciones de distribución en el espacio de fases, centrado en el estudio de la función de Wigner, y principalmente en la función de Husimi que vamos a utilizar como herramienta para el estudio de sistemas no lineales. Una revisión muy completa acerca de las funciones de distribución y su aplicaciones puede encontrarse en la referencia [58].

6.2. Definición de las funciones de distribución

La principal ventaja del uso de la formulación en el espacio de fases de la mecánica cuántica es que prescinde del uso de operadores. Así el valor esperado de un operador arbitrario $\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$ que representa un cierto observable mecanocuántico puede calcularse usando una función de distribución $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ de la siguiente forma:

$$\langle \hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \rangle = Tr\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) \hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})\} = \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} A(\mathbf{q}, \mathbf{p}) F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (6.1)$$

donde $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ es una función escalar obtenida de reemplazar los operadores $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ para \hat{A} por las variables \mathbf{q} y \mathbf{p} . Como hemos comentado, no existe una forma única forma de definir una función de distribución en el espacio de fases cuántico, debido a la no conmutabilidad de los operadores mecanocuánticos. Con objeto de ilustrar esto, calculamos el valor esperado del operador $e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}}$ con la función de distribución $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, donde ξ y η son constantes vía (6.1)

$$\langle e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}} \rangle = Tr\{\hat{\rho} e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}}\} = \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}} F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (6.2)$$

Si ahora se calcula el valor esperado de otro operador $e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}$ se obtiene

$$\langle e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}} \rangle = Tr\{\hat{\rho}e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}\} = \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}} F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (6.3)$$

Si se comparan (6.2) y (6.3) se observa que F no puede ser la misma función en ambas expresiones: los dos operadores exponenciales no son iguales:

$$e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} = e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}e^{i\hbar\xi\eta/2} \neq e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}} \quad (6.4)$$

Sin embargo, sí es cierta la igualdad

$$e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}} = e^{i\xi\mathbf{q}}e^{i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.5)$$

Por tanto, no existe una única forma de asignar a una función de variables conjugadas escalares un único operador mecanocuántico. Para evitar estas ambigüedades, se debe elegir una función $f(\xi, \eta)$ de modo que $e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}$ se asocie exclusivamente con un operador determinado

$$f(\xi, \eta)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} = e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}} \quad (6.6)$$

De esta forma, a través de $f(\xi, \eta)$ se establece una correspondencia uno a uno entre escalares y operadores, constituyendo una regla de asociación. En función de las $f(\xi, \eta)$ elegidas, se llega a las distintas funciones de distribución cuánticas en el espacio de fases (Wigner, Husimi ...). Especificando $f(\xi, \eta)$ se define $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ de forma única.

Así, para definir una clase general de funciones de distribución en el espacio de fases se procede de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle f(\xi, \eta)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} \rangle &= Tr\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}}f(\xi, \eta)\} \\ &= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \end{aligned} \quad (6.7)$$

donde f remarca la dependencia de F en $f(\xi, \eta)$. La ecuación anterior, además de definir cómo asociar operadores exponenciales con escalares, puede aplicarse a cada término de la expansión de Fourier de un operador arbitrario \hat{A}

$$\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi \int d\eta \tilde{A}(\xi, \eta) e^{i\xi\hat{q}+i\eta\hat{p}} \quad (6.8)$$

y por tanto la función escalar asociada con \hat{A} es

$$A^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} \int d\xi \int d\eta \frac{\tilde{A}(\xi, \eta)}{f(\xi, \eta)} e^{i\xi\mathbf{q}+i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.9)$$

¹Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff: $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{[\hat{A}+\hat{B}]/2}$

Para calcular el valor esperado asociado al operador \hat{A} se tiene que

$$\begin{aligned}\langle \hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \rangle &= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} A^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\xi \int d\eta \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} \frac{\tilde{A}(\xi, \eta)}{f(\xi, \eta)} e^{i\xi\mathbf{q} + i\eta\mathbf{p}} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t).\end{aligned}\quad (6.10)$$

Para obtener ahora una expresión explícita para la función de distribución F^f se parte de (6.7) y se aplica la transformada de Fourier correspondiente

$$F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) e^{i\xi\hat{\mathbf{q}} + i\eta\hat{\mathbf{p}}} f(\xi, \eta)\} e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}} \quad (6.11)$$

La exponencial $e^{i\eta\mathbf{p}}$ actúa como un operador de traslación en el espacio de coordenadas

$$e^{i\eta\mathbf{p}} | \mathbf{q}'' \rangle = \hat{T}(-\hbar\eta) | \mathbf{q}'' \rangle = | \mathbf{q}'' - \hbar\eta \rangle \quad (6.12)$$

de modo que

$$e^{i\xi\hat{\mathbf{q}} + i\eta\hat{\mathbf{p}}} | \mathbf{q}'' \rangle = e^{i\hbar\xi\eta/2} e^{i\xi\mathbf{q}} e^{i\eta\mathbf{p}} | \mathbf{q}'' \rangle = e^{i\hbar\xi\eta/2} e^{i\xi\mathbf{q}''} | \mathbf{q}'' - \hbar\eta \rangle \quad (6.13)$$

si se hace $\mathbf{q}' = \mathbf{q}'' - \hbar\eta/2$ e insertando $1 = \int d\mathbf{q}' | \mathbf{q}' \rangle \langle \mathbf{q}'' |$ la ecuación (6.11) queda

$$F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \int d\mathbf{q}' \langle \mathbf{q}' + \hbar\eta/2 | \hat{\rho} | \mathbf{q}' - \hbar\eta/2 \rangle f(\xi, \eta) e^{i\xi(\mathbf{q}' - \mathbf{q})} e^{-i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.14)$$

Para el caso de un estado puro $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ se obtiene

$$F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \int d\mathbf{q}' \psi^*(\mathbf{q}' - \hbar\eta/2, t) \psi(\mathbf{q}' + \hbar\eta/2, t) f(\xi, \eta) e^{i\xi(\mathbf{q}' - \mathbf{q})} e^{-i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.15)$$

6.3. La función de distribución de Wigner

La elección más sencilla para $f(\xi, \eta)$, $f(\xi, \eta) = 1$ da lugar a la llamada *ley de asociación de Weyl* $e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}} \leftrightarrow e^{-i\xi\hat{\mathbf{q}} - i\eta\hat{\mathbf{p}}}$. Con esta opción, la ecuación (6.14) se convierte en

$$\begin{aligned}F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) e^{i\xi\hat{\mathbf{q}} + i\eta\hat{\mathbf{p}}}\} e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\eta \langle \mathbf{q} + \hbar\eta/2 | \hat{\rho} | \mathbf{q} - \hbar\eta/2 \rangle e^{-i\eta\mathbf{p}}.\end{aligned}\quad (6.16)$$

que es la llamada *función de distribución de Wigner*. Para el caso de un estado puro la ecuación (6.16) toma la forma

$$F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2\pi} \int d\eta e^{-i\mathbf{p}\eta} \psi^*(\mathbf{q} - \hbar\eta/2, t) \psi(\mathbf{q} + \hbar\eta/2, t) \quad (6.17)$$

donde $|F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)| \leq \frac{1}{\pi\hbar}$.

Esta función tiene una propiedad muy interesante, y es que proyectando sobre el espacio de posiciones o sobre el de momentos se obtienen las distribuciones correctas en dichos espacios [59]

$$\int d\mathbf{p} F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = |\langle \mathbf{q} | \Psi \rangle|^2 \quad \int d\mathbf{q} F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = |\langle \mathbf{p} | \Psi \rangle|^2 \quad (6.18)$$

y está normalizada

$$\int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = 1 \quad (6.19)$$

ya que el estado $|\Psi\rangle$ ha de estar normalizado en cualquier representación ($\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$).

Por tanto, la función $F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ parece una buena candidata a cumplir el papel de distribución de probabilidad en el espacio de fases. Esto es, $F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ sería la *densidad de probabilidad* de encontrar al sistema en el punto (\mathbf{q}, \mathbf{p}) del espacio de fases. Sin embargo no es así: la función de Wigner no se puede interpretar estrictamente como una densidad de probabilidad debido a que toma valores *negativos*. Desde el punto de vista de la correlación con la mecánica clásica tampoco parece satisfactoria, siéndolo en mayor medida otra función conocida como *función de Husimi*.

6.4. Funciones de distribución normal y antinormal.

Aquellos sistemas que pueden describirse como un oscilador armónico de masa m y de frecuencia ω , o como una combinación de osciladores se pueden estudiar de forma bastante eficiente a través de las *funciones de distribución normal y antinormal*: $F^N(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ y $F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$. En el caso del oscilador armónico, estas funciones se definen considerando ordenamientos normales y antinormales respecto a los operadores escalera \hat{a} y \hat{a}^\dagger

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{\mathbf{q}} + i\hat{\mathbf{p}}) \quad (6.20)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{\mathbf{q}} - i\hat{\mathbf{p}}) \quad (6.21)$$

Cuando los operadores están normalmente ordenados, todas las potencias del operador \hat{a}^\dagger preceden a todas las potencias del operador \hat{a} . El operador $e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}}$, multiplicado por

$$f^N(\xi, \eta) = e^{\frac{\hbar\xi^2}{4m\omega} + \frac{\hbar m\omega\eta^2}{4}} \quad (6.22)$$

se convierte en el operador normalmente ordenado $e^{z\hat{a}^\dagger}e^{-z^*\hat{a}}$, donde

$$z = i\xi\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} - \eta\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \quad (6.23)$$

Por tanto, la regla de asociación normal puede escribirse como

$$e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}} \leftrightarrow e^{z\hat{a}^\dagger}e^{-z^*\hat{a}} \quad (6.24)$$

Sustituyendo la ecuación (6.22) en (6.14) se obtiene la *función distribución normal en el espacio de fases*

$$F^N(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}}\} e^{-i\xi\mathbf{q}-i\eta\mathbf{p}} \quad (6.25)$$

que para un estado puro queda

$$F^N(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \langle \psi(t) | e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}} | \psi(t) \rangle e^{-i\xi\mathbf{q}-i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.26)$$

La función de distribución F^N se conoce como función de distribución de Glauber-Sudarshan, o como *función P* en óptica cuántica.

De forma similar se logra un ordenamiento antinormal del operador $e^{i\xi\hat{\mathbf{q}}+i\eta\hat{\mathbf{p}}}$ multiplicándolo por

$$f^{AN}(\xi, \eta) = \frac{1}{f^N(\xi, \eta)} = e^{\frac{-\hbar\xi^2}{4m\omega} - \frac{\hbar m\omega\eta^2}{4}} \quad (6.27)$$

y la correspondiente *función de distribución antinormal* viene dada por

$$F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}\} e^{-i\xi\mathbf{q}-i\eta\mathbf{p}} \quad (6.28)$$

donde $0 \leq F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \leq \frac{1}{2\pi\hbar}$.

Para un estado puro

$$F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \langle \psi(t) | e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger} | \psi(t) \rangle e^{-i\xi\mathbf{q}-i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.29)$$

La función de distribución F^{AN} se conoce de forma habitual como la *función Q* en óptica cuántica. Una propiedad muy útil de esta distribución, que no va demostrarse, es la siguiente:

$$\begin{aligned} F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \langle \beta_{\mathbf{qp}} | \hat{\rho} \beta_{\mathbf{qp}} \rangle \\ F^{AN}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} | \langle \beta_{\mathbf{qp}} | \psi(t) \rangle |^2 \end{aligned} \quad (6.30)$$

donde $\beta_{\mathbf{qp}}$ representa un estado coherente. En una dimensión en la representación de configuraciones

$$\langle x | \beta_{\mathbf{qp}} \rangle = \beta_{\mathbf{qp}}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega(x-\mathbf{q})^2/2\hbar} e^{i\mathbf{p}x/\hbar} \quad (6.31)$$

Un estado coherente tiene como propiedad ser un estado de mínima incertidumbre $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.

6.4.1. Función de distribución de Husimi

Entre una amplia variedad de funciones de distribución cuánticas en el espacio de fase, la *función de distribución de Husimi* desempeña un papel importante, ya que representa una clase general de funciones de distribución no negativas, que incluye a la función Q como caso particular. En nuestro estudio, resulta muy útil por sus aplicaciones en la física no lineal.

Una de las propiedades más obvias de una verdadera distribución de probabilidad es que es siempre no negativa. La función de distribución de Wigner presenta el problema de que puede tomar valores negativos. Una forma adecuada para obtener una distribución no negativa consiste en suavizar la función de Wigner con un paquete de ondas gaussiano. La función de distribución que resulta de este proceso recibe el nombre de función de distribución de Husimi y se define como

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int d\mathbf{q}' \int d\mathbf{p}' e^{[-m\kappa(\mathbf{q}'-\mathbf{q})^2/\hbar - (\mathbf{p}'-\mathbf{p})^2/\hbar m\kappa]} F^W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (6.32)$$

donde κ puede ser cualquier constante positiva. La función de suavizado gaussiana debe ser un paquete de ondas de mínima incertidumbre. Como los distintos valores de κ dan lugar a diferentes distribuciones, la ecuación (6.32) define una familia de funciones de distribución no negativas. Si F^H se usa para describir un oscilador armónico y κ es igual a su frecuencia ω , F^H se reduce a la función de distribución antinormal Q . Por tanto, la función de distribución de Husimi incluye la función Q en un caso especial. la función Q no es más que la función

de Wigner suavizada mediante un paquete de ondas correspondiente a un estado coherente ($\Delta \mathbf{q} = \sqrt{\hbar/2m\omega}$; $\Delta \mathbf{p} = \sqrt{\hbar m\omega/2}$). La función de Husimi incluye además la función de Wigner suavizada con cualquier paquete gaussiano para el cual se mantenga la relación $\Delta \mathbf{q} \Delta \mathbf{p} = 1/2\hbar$.

La obtención de la función de distribución de Husimi puede plantearse también a partir de la función f^{AN} en la que se sustituye ω por κ

$$f^H(\xi, \eta) = e^{\frac{-\hbar\xi^2}{4m\kappa} - \frac{\hbar m\kappa\eta^2}{4}} \quad (6.33)$$

y la función de distribución F^H puede escribirse como

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) f^H(\xi, \eta)\} e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}} \quad (6.34)$$

Para encontrar la regla de asociación recordamos que $e^{i\xi\hat{\mathbf{q}} + i\eta\hat{\mathbf{p}}} f^{AN}(\xi, \eta)$ puede escribirse en orden antinormal como $e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}$. La regla de asociación para la función de distribución de Husimi se obtiene a partir de la regla de asociación de la función Q sustituyendo ω por κ

$$e^{i\xi\hat{\mathbf{q}} + i\eta\hat{\mathbf{p}}} f^H(\xi, \eta) = e^{-\nu^*\hat{b}} e^{\nu\hat{b}^\dagger} \quad (6.35)$$

donde ν y \hat{b} vienen dados por las mismas fórmulas que z y \hat{a} exceptuando que ω debe sustituirse por κ

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\kappa}}(m\kappa\hat{\mathbf{q}} + i\hat{\mathbf{p}}) \quad (6.36)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\kappa}}(m\kappa\hat{\mathbf{q}} - i\hat{\mathbf{p}}) \quad (6.37)$$

Por tanto, la función de Husimi está asociada a un ordenamiento antinormal de los operadores \hat{b} y \hat{b}^\dagger y se puede escribir como

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \text{Tr}\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t) e^{-\nu^*\hat{b}} e^{\nu\hat{b}^\dagger}\} e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.38)$$

Para un estado puro

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta \langle \psi(t) | e^{-\nu^*\hat{b}} e^{\nu\hat{b}^\dagger} | \psi(t) \rangle e^{-i\xi\mathbf{q} - i\eta\mathbf{p}}. \quad (6.39)$$

En ocasiones, como la función de distribución de Husimi incluye la función Q en un caso especial, recibe el nombre de *función de distribución antinormal generalizada*.

Se puede calcular el valor esperado de un operador arbitrario $\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$ usando la función de distribución de Husimi. Para ello se necesita expresar el operador \hat{A} en orden antinormal respecto de los operadores \hat{b} y \hat{b}^\dagger , $\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{A}^H(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ y encontrar la versión escalar $A^H(\beta, \beta^*)$ reemplazando \hat{b} y \hat{b}^\dagger en $\hat{A}^H(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ por las variables escalares β y β^* respectivamente, donde

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\kappa}}(m\kappa\mathbf{q} + i\mathbf{p}). \quad (6.40)$$

Ahora se puede evaluar el valor esperado mediante la ecuación

$$\langle \hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \rangle = Tr\{\hat{\rho}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}, t)\hat{A}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})\} = \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} \hat{A}^H(\beta, \beta^*) F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t). \quad (6.41)$$

El suavizado de la función de Wigner con una función gaussiana para dar lugar a la función de distribución de Husimi no destruye ninguna información física significativa. Esto se debe al hecho de que el suavizado gaussiano está necesariamente involucrado en el proceso observacional [57]. Las observaciones cuánticas no permiten obtener ninguna estructura más fina en escala que las permitidas por el principio de incertidumbre. Son exactamente estas variaciones finas de la función de Wigner las que desaparecen al suavizarla mediante un paquete gaussiano.

6.4.2. Función de distribución de Husimi en el espacio de fases (\mathbf{q}, \mathbf{p})

La función de distribución de Husimi resulta muy útil a la hora de describir la dinámica cuántica de una importante variedad de sistemas no lineales. En estos casos se suele usar para el estudio el espacio de fases (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , en el que la función de Husimi presenta varias ventajas frente a otras distribuciones.

La función de Husimi posee una estructura regular y es más sencilla que la función de Wigner, y por tanto más adecuada para la interpretación física. Esto es fundamental en estudios de la dinámica cuántica de sistemas complejos para los que la función de Wigner adopta una forma extremadamente compleja.

La función de distribución de Husimi puede tomarse como el operador de densidad en la representación de paquetes gaussianos de mínima incertidumbre. En el espacio (\mathbf{q}, \mathbf{p})

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \langle \beta_{\mathbf{qp}} | \hat{\rho} | \beta_{\mathbf{qp}} \rangle \quad (6.42)$$

donde $|\beta_{\mathbf{qp}}\rangle$ representa la función de onda para un paquete gaussiano de mínima incertidumbre centrado en (\mathbf{q}, \mathbf{p}) . En un dimensión

$$\langle x | \beta_{\mathbf{qp}} \rangle = \beta_{\mathbf{qp}}(x) = \left(\frac{m\kappa}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\kappa(x-\mathbf{q})^2/2\hbar} e^{i\mathbf{p}x/\hbar} \quad (6.43)$$

Para el caso de un estado puro, la ecuación (6.42) se convierte en

$$F^H(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| \int dx \beta_{x,p}(x)^* \psi(\bar{x}, t) \right|^2. \quad (6.44)$$

Si generalizamos para N dimensiones, obtenemos

$$F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \left| \int d\mathbf{q} \beta_{\mathbf{q},\mathbf{p}}(\mathbf{q})^* \psi(\mathbf{q}, t) \right|^2. \quad (6.45)$$

Dada $\psi(x, t)$, esta ecuación proporciona la manera más sencilla de evaluar la función de distribución de Husimi. Alternativamente, se puede computar la función de Wigner y llevar a cabo el posterior suavizado gaussiano.

Hay que resaltar que \mathbf{p} y \mathbf{q} no son ahora puntos de posición y momento, sino valores medios de posición y momento. A la luz de este enfoque resulta evidente que la función de distribución de Husimi es no negativa y que representa una densidad de probabilidad en un "espacio de fases cuántico" (\mathbf{p}, \mathbf{q}) . Se ha criticado a esta función que, a diferencia de lo que sucede con la función de Wigner, sus proyecciones en el espacio \mathbf{q} o en el espacio \mathbf{p} no proporcionan las correspondientes densidades de probabilidad, aunque siempre es posible hacer un cambio de base para obtener las distribuciones correctas [60]. Además, hay que resaltar la mejor convergencia de la función de Husimi respecto a la de Wigner con el espacio de fases clásico [57]. La función $F^W(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ tiene fuertes oscilaciones muy picudas, mientras que $F^H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ es una función suave que converge muy bien con el caso clásico en algunos sistemas [59]

Superficies de Poincaré cuánticas

La función de Husimi de un sistema con N grados de libertad dependerá de $2N$ variables independientes, de modo que la representación gráfica requerirá un espacio $(2N + 1)$ -dimensional. Así pues, tan sólo es posible una representación gráfica completa de la función de Husimi para sistemas monodimensionales ($N = 1$). En el caso de sistemas con dos grados de libertad es posible definir la *superficie de sección de Poincaré cuántica*, de tal manera que el número de grados de libertad se reduzca de cuatro a dos, de forma análoga a la que estudiábamos para el caso clásico en la sección 2.2.1. No existe, sin embargo, una definición única de superficie de sección cuántica [59].

En sistemas con dos grados de libertad es posible definir una superficie de sección cuántica análoga a la utilizada en el caso clásico (sección 2.3):

$$F^H(x_1, p_1) = F^H[x_1, x_2 = cte, p_1, p_2 = p_2^E(x_1, x_2 = cte, p_1)] \quad (6.46)$$

donde F^H es la función de Husimi y p_2 viene dado por la expresión clásica (2.47) dependiendo de la energía E del sistema. El procedimiento empleado es idéntico al clásico: se fija el valor de una de las coordenadas (la superficie de sección) y su momento conjugado se obtiene por conservación de la energía. Al igual que sucedía en el caso clásico aquí tenemos que realizar una elección arbitraria de signo en $p_2^E(x_1, x_2 = cte, p_1)$. La función $F^H(x_1, p_1)$ debe interpretarse como la densidad de probabilidad de encontrar el sistema en el punto (x_1, p_1) cuando este tiene los valores *determinados* $x_2 = cte.$ y $p_2 = p_2^E(x_1, x_2 = cte, p_1)$.

6.5. Propiedades de las funciones de distribución

Con la posible excepción de la función antinormal Q y la función de distribución de Husimi, el resto de funciones estudiadas no pueden considerarse verdaderas distribuciones de probabilidad, ya que pueden tomar valores negativos. Sin embargo, a pesar de ello, estas funciones de distribución de *cuasiprobabilidad* resultan muy útiles, ya que la formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases ofrece la ventaja de que proporciona un marco en el que los fenómenos cuánticos pueden interpretarse de forma clásica y la cuestión de la correspondencia clásico-cuántica puede plantearse directamente. A continuación recogemos a modo de resumen las propiedades que debe cumplir una función de distribución de probabilidad y un cuadro en el que se comprueba si las funciones de Wigner, Husimi, normal y antinormal cumplen o no estas propiedades.

Las propiedades que debe tener una función de distribución de probabilidad son las siguientes:

1. La función de distribución debe ser bilinear en la función de onda ψ . Esto implica que la función $f(\xi, \eta)$ debe ser independiente de ψ .
2. La función de distribución debe ser real para todo \mathbf{q}, \mathbf{p} y t .
3. La función de distribución debe ser no negativa para todo \mathbf{q}, \mathbf{p} y t .
4. La función de distribución debe dar las distribuciones marginales mecano-

cuánticas correctamente, es decir

$$\int d\mathbf{p} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{q} | \hat{\rho} | \mathbf{q} \rangle \quad (6.47)$$

$$\int d\mathbf{q} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \langle \mathbf{p} | \hat{\rho} | \mathbf{p} \rangle \quad (6.48)$$

$$(6.49)$$

o para un estado puro

$$\int d\mathbf{p} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = |\psi(\mathbf{q}, t)|^2 \quad (6.50)$$

$$\int d\mathbf{p} F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 \quad (6.51)$$

$$(6.52)$$

Por tanto la función $f(\xi, \eta)$ debe cumplir $f(0, \eta) = f(\xi, 0) = 1$.

5. Sea el conjunto de funciones F_{nm}^f definido como

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{q}) \quad (6.53)$$

donde $\phi_n(\mathbf{q})$ representa el n-avo autoestado del sistema. Entonces la función de distribución en el espacio de fases toma la forma

$$F^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{n,m} a_n^*(t) a_m(t) F_{nm}^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad (6.54)$$

donde

$$F_{nm}^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{4\pi^2} \int d\xi \int d\eta d\mathbf{q}' \phi_n^*(\mathbf{q}' - \eta\hbar/2) \phi_n(\mathbf{q}' + \eta\hbar/2) f(\xi, \eta) e^{i\xi(\mathbf{q}' - \mathbf{q})} e^{i\eta\mathbf{p}} \quad (6.55)$$

El conjunto de funciones F_{nm}^f debe formar un conjunto completo y ortonormal, es decir, debe obedecer las siguientes ecuaciones

$$\int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} F_{nm}^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) F_{n'm'}^{f*}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} \delta_{nn'} \delta_{mm'} \quad (6.56)$$

$$\sum_{n,m} F_{nm}^f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) F_{nm}^{f*}(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = \frac{1}{2\pi} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (6.57)$$

Esto ocurre si elegimos la función $f(\xi, \eta)$ de modo que $|f| = 1$

Función de distribución	bilinear	real	no negativa	distribución marginal	completa, ortonormal
Wigner (F^W)	sí	sí	no	sí	sí
Función P (F^N)	sí	sí	no	no	no
Función Q (F^{AN})	sí	sí	sí	no	no
Husimi (F^H)	sí	sí	sí	no	no

Cuadro 6.1: *Propiedades de las funciones de distribución en el espacio de fases*

Wigner [55] demostró que las distribuciones no negativas que proporcionan las distribuciones mecanocuánticas marginales correctas y que al mismo tiempo son bilineales en la función de onda no existen. Por consiguiente, no existe ninguna función de distribución en el espacio de fases que posea todas las propiedades necesarias para que pueda considerarse una verdadera función de distribución de probabilidad. Esto no es más que una consecuencia necesaria del hecho de que la mecánica cuántica está basada en el principio de incertidumbre de Heisenberg. Sin embargo, todas las funciones de distribución estudiadas resultan muy útiles en determinados contextos físicos y permiten obtener el valor esperado de cualquier operador arbitrario.

En la tabla (6.1) se recogen las funciones de distribución estudiadas y si cumplen o no las propiedades anteriormente mencionadas.

Capítulo 7

Construcción y análisis de funciones de scar. Oscilador cuártico

7.1. Aspectos clásicos del oscilador cuártico

El sistema elegido para llevar a cabo nuestro estudio es el llamado oscilador cuártico cuyo Hamiltoniano clásico, H , se escribe como

$$H = \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m} + \alpha_{cl} \frac{(x^2 y^2)}{2} + \beta_{cl} \frac{(x^4 + y^4)}{4} \quad (7.1)$$

donde trabajaremos con $\alpha_{cl} = 1$ u.a. y $\beta_{cl} = 0,01$ u.a.

La elección se justifica por varias razones: En primer lugar, el movimiento clásico de este sistema cuando $\beta_{cl} \rightarrow 0$ es altamente caótico, y prácticamente todas las órbitas periódicas existentes en el sistema son inestables [61]. En la figura (7.1) se incluyen algunas de estas órbitas. Durante mucho tiempo se pensó que para este límite el sistema era totalmente ergódico, pero en 1990 Dahlqvist *et al* [62] demostraron la existencia de al menos una familia de órbitas periódicas estables. Ahora bien, la región de estabilidad en el espacio de fases es extremadamente pequeño de forma que su influencia en la dinámica global es despreciable.

Nuestro propósito es el de construir funciones de scar sobre ciertas órbitas periódicas inestables del sistema. Para el estudio hemos elegido en particular las órbitas representadas en la parte inferior de la figura (7.1), que vamos a denominar a partir de ahora *órbita cuadrada* y *órbita lazo*. La razón por la cual escogemos estas órbitas en particular es que en el trabajo previo de Polavieja *et al* [10] se construían funciones de scar en el sistema cuártico trabajando con la órbita cuadrada. Para ello, situaban un paquete de onda sobre la órbita cuadrada y se dejaba

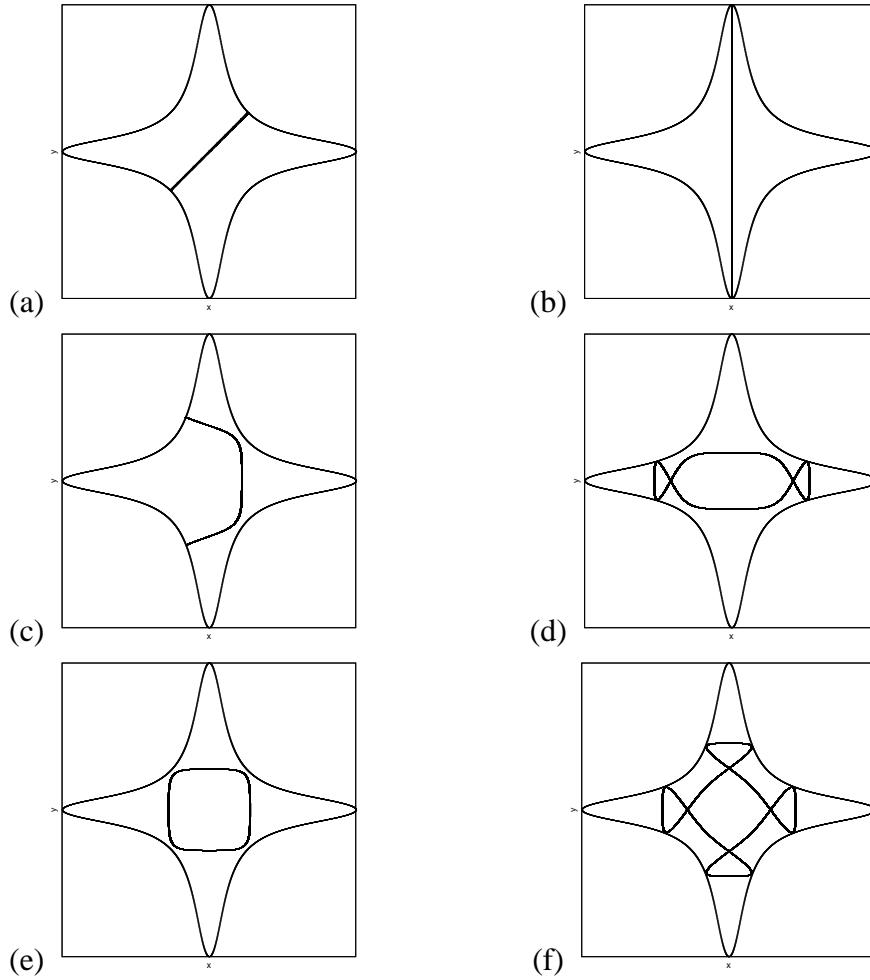


Figura 7.1: Algunas órbitas periódicas inestables del sistema cuártico. El sistema es escalable, y por tanto sus órbitas periódicas son idénticas para cualquier energía estudiada. En la parte inferior se recogen las dos órbitas en las que hemos basado nuestro estudio: la órbita cuadrada, (e) y la órbita lazo, (f)

evolucionar a lo largo de la misma para obtener la función de scar a partir de sus frecuencias. Sin embargo cuando se intenta aplicar este método a una órbita más larga y compleja, como por ejemplo la órbita lazo, falla. Esto es debido a que un paquete de ondas situado sobre una órbita larga y con mucha estructura (como por ejemplo el lazo), tendía al evolucionar desviándose hacia órbitas periódicas más cortas relacionadas con ella (como la órbita cuadrada), y no adquiría la información necesaria para construir la función de scar. Con nuestro método, vamos a reproducir los resultados de Polavieja *et al* para la órbita cuadrada, y además vamos a ser capaces de construir funciones de scar sobre la órbita lazo.

Una razón adicional que justifica la elección del sistema cuártico como sistema de estudio, es que tanto el término de energía potencial como el de energía cinética son homogéneos, y como consecuencia, la dinámica clásica del oscilador cuártico es escalable con la energía, cambiando únicamente con el valor de β_{cl} en la ecuación (7.1). Esta propiedad del oscilador cuártico va a facilitar en gran medida los cálculos clásicos que queramos efectuar, ya que la dinámica del sistema es similar para cualquier valor de la energía. Si resolvemos las ecuaciones de Hamilton (2.1) para la ecuación (7.1) a partir de una determinada condición inicial $(\mathbf{q}_0(0), \mathbf{p}_0(0))$ obtendremos una trayectoria $(\mathbf{q}_0(t), \mathbf{p}_0(t))$ para una energía E_0 . La dinámica similar del oscilador cuártico implica la existencia de unas leyes de escalado que nos permitirán obtener cualquier otra trayectoria $(\tilde{\mathbf{q}}(\tilde{t}), \tilde{\mathbf{p}}(\tilde{t}))$ del sistema a una energía E a partir de la trayectoria original $(\mathbf{q}_0(t), \mathbf{p}_0(t))$. Estas leyes de escalado pueden deducirse de la siguiente forma: partimos de un Hamiltoniano

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E_0 \quad (7.2)$$

Si el sistema es escalable, es posible escribir

$$\begin{aligned} H(\gamma\mathbf{q}, \gamma^2\mathbf{p}) &= \gamma^4 E_0 \\ \tilde{H}(\gamma\mathbf{q}, \gamma^2\mathbf{p}) &= \tilde{E} \end{aligned} \quad (7.3)$$

donde γ es un parámetro adimensional. Escribimos las nuevas variables como

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{q}} &= \gamma\mathbf{q} \\ \tilde{\mathbf{p}} &= \gamma^2\mathbf{p} \end{aligned} \quad (7.4)$$

y a partir de ellas reformulamos la ecuación de Hamilton

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{d\mathbf{q}}{dt}. \quad (7.5)$$

Manipulando la ecuación (7.5)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\mathbf{p}}} &= \gamma^3 \frac{d\tilde{\mathbf{q}}}{d\tilde{t}} \\ \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\mathbf{p}}} &= \gamma \frac{d\tilde{\mathbf{q}}}{d\tilde{t}}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

si tomamos el tiempo escalado como

$$\tilde{t} = \frac{t}{\gamma} \quad (7.7)$$

podemos escribir la ecuación (7.6) como

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\mathbf{p}}} = \frac{d\tilde{\mathbf{q}}}{d\tilde{t}} \quad (7.8)$$

lo que implica que la dinámica es escalable, con

$$\gamma^4 = \frac{\tilde{E}}{E_0}. \quad (7.9)$$

Si llamamos $E = \tilde{E}$ llegamos a la reglas de escalado

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{q}}(\tau) &= (E/E_0)^{1/4} \mathbf{q}_0(t) \\ \tilde{\mathbf{p}}(\tau) &= (E/E_0)^{1/2} \mathbf{p}_0(t) \end{aligned} \quad (7.10)$$

y el tiempo escalado \tilde{t} satisface

$$\tilde{t} = (E/E_0)^{-1/4} t. \quad (7.11)$$

En el trabajo que vamos a desarrollar nos interesa también obtener la variación de la acción clásica a lo largo de las trayectorias. La acción clásica se define como

$$S = \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} \quad (7.12)$$

y satisface a su vez la relación de escalado

$$S(E) = S(E_0) (E/E_0)^{3/4}. \quad (7.13)$$

Nuestro objetivo consiste en obtener las órbitas periódicas del sistema sobre las cuales construiremos posteriormente nuestras funciones de scar. Para ello basta con resolver las ecuaciones de Hamilton (2.1) del sistema a una única energía para un periodo, y las leyes de escalado descritas nos permitirán llevar los resultados a cualquier otra energía posible. Además resolveremos la ecuación

$$S(T) = \int_0^T 2E_c(t) dt \quad (7.14)$$

que es una modificación de la ecuación (7.12) que nos permitirá obtener la variación de S en el periodo para cada órbita, necesaria para construir las funciones de scar. Para la resolución de las ecuaciones de Hamilton y de la ecuación (7.14) utilizamos un integrador *Runge Kutta* de orden 4, a partir de las condiciones iniciales adecuadas para la órbita periódica que deseamos obtener. ¹

¹Un Runge Kutta de orden 4 no constituye una rutina integradora especialmente potente. Sin embargo, con un paso de integración pequeño, y dado que nuestros intervalos de integración son reducidos, resulta totalmente adecuado.

En nuestro caso estamos especialmente interesados, como hemos puesto de manifiesto, en obtener las órbitas periódicas cuadrada y lazo de las figuras (7.1-e y f). Para el ejemplo concreto de la órbita periódica cuadrada (figura 7.1-e) podemos encontrar la condición inicial adecuada haciendo uso de las propiedades de simetría de esta órbita: sabemos que para $y_0 = 0$, $p_{y_0} = 0$. Eligiendo una energía de referencia E_0 para el estudio y haciendo un barrido para la condición inicial para x_0 (lo que define automáticamente la condición inicial p_{x_0}), integramos las ecuaciones de Hamilton en cada caso hasta que conseguimos la órbita buscada, que se cierra sobre sí misma. Para conseguir la órbita lazo actuaremos de forma análoga.

7.2. Estudio cuántico del oscilador cuántico

7.2.1. Propiedades de escalado

En el estudio cuántico del sistema cuántico también van a mostrarse las propiedades de escalado del sistema. Un sistema cuyas energías potenciales y cinéticas son homogéneas es escalable. Si consideramos la ecuación de autovalores para un sistema con N grados de libertad en la representación de coordenadas

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}^2} + V(\mathbf{q}) \right] \psi(\mathbf{q}) = E \psi(\mathbf{q}) \quad (7.15)$$

donde el potencial $V(\mathbf{q})$ es una función homogénea de grado g

$$V(\lambda \mathbf{q}) = \lambda^g V(\mathbf{q}). \quad (7.16)$$

Definiendo unas nuevas variables, análogas a las utilizadas en (??) escribimos

$$\tilde{\mathbf{q}} = \lambda \mathbf{q}$$

y para el caso del potencial cuántico (7.16) se convierte en

$$V(\tilde{\mathbf{q}}) = V(\lambda \mathbf{q}) = \lambda^g V(\mathbf{q}). \quad (7.17)$$

Desarrollamos el Hamiltoniano (7.15) en las nuevas variables llegando a

$$\left[-\frac{\hbar^2 \lambda^6}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\mathbf{q}}^2} + V(\tilde{\mathbf{q}}) \right] \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{q}}) \sqrt{\lambda} = \lambda^g E \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{q}}) \sqrt{\lambda} \quad (7.18)$$

donde se ha utilizado

$$\begin{aligned} |\psi(\mathbf{q})|^2 d\mathbf{q} &= |\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{q}})|^2 d\tilde{\mathbf{q}} \\ \psi(\mathbf{q}) &= \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{q}}) \sqrt{\lambda} \end{aligned} \quad (7.19)$$

. Para obtener la ley de escalado, la ecuación (7.18) debe poder escribirse como una ecuación equivalente a (7.15), y para ello debe cumplirse que

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{\hbar}^2}{2m} &= \gamma^6 \frac{\hbar^2}{2m} \\ \gamma &= \left(\frac{\tilde{\hbar}}{\hbar}\right)^{1/3},\end{aligned}\quad (7.20)$$

con lo que encontramos las relaciones

$$E_n = \left(\frac{\tilde{\hbar}}{\hbar}\right)^{4/3} E'_n \quad (7.21)$$

$$\mathbf{q} = \left(\frac{\tilde{\hbar}}{\hbar}\right)^{1/3} \mathbf{q}. \quad (7.22)$$

7.2.2. Autofunciones y autovalores

Para obtener los niveles de energía cuánticos vamos a construir una representación del Hamiltoniano cuántico para el oscilador cuártico

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2)}{2m} + \frac{\alpha m^2 \omega^3 (\hat{x}^2 \hat{y}^2)}{2\hbar} + \frac{\beta m^2 \omega^3 (\hat{x}^4 + \hat{y}^4)}{4\hbar} \quad (7.23)$$

en una base adecuada. En el sistema de unidades atómicas, \hbar toma el valor de 1 u.a. En todo el estudio vamos a trabajar con una masa de $m = 1$ u.a. y al igual que en el caso clásico, tomaremos $\alpha = 1$ u.a. y $\beta = 0,01$ u.a.

Para llevar a cabo un análisis adecuado del problema es necesario tener en cuenta la simetría del sistema. En nuestro caso, \hat{H} corresponde al grupo de simetría C_{4v} , que consta de cuatro representaciones irreducibles monodimensionales, A_1, A_2, B_1, B_2 , y a una representación irreducible bidimensional, E . Por tanto, los autoestados del hamiltoniano pueden clasificarse en función de estas clases de simetría. Vamos a comenzar resolviendo el problema sin tener en cuenta la simetría de las autofunciones. La base elegida es la base de funciones del oscilador armónico bidimensional φ_{n_x, n_y} , que constituye un conjunto ortonormal completo, de forma que podemos escribir cualquier función propia de la forma

$$\phi(x, y) = \sum_{n_x, n_y}^f c_{n_x, n_y} \varphi_{n_x, n_y}(x, y) \quad (7.24)$$

en el espacio de configuraciones, donde

$$\varphi_{n_x, n_y}(x, y) = N_{n_x} H_{n_x}(\sqrt{\beta}x) e^{-\beta^2 x^2/2} N_{n_y} H_{n_y}(\sqrt{\beta}y) e^{-\beta^2 y^2/2} \quad (7.25)$$

siendo N_{n_x} y N_{n_y} constantes de normalización

$$N_{n_x} = \left[\frac{1}{2^{n_x} n_x!} \right]^{1/2} \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{1/4} \quad y \quad N_{n_y} = \left[\frac{1}{2^{n_y} n_y!} \right]^{1/2} \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{1/4}, \quad (7.26)$$

y $\beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$. Finalmente $H_{n_x}(x)$ y $H_{n_y}(y)$ son los polinomios de Hermite para n_x y n_y en x e y respectivamente.

Para obtener las autofunciones y energías del sistema, vamos a escribir la matriz del Hamiltoniano (7.23) en términos de los operadores de creación, a , y aniquilación, a^\dagger , sabiendo que

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_x^\dagger + a_x) \\ \hat{y} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_y^\dagger + a_y) \\ \hat{p}_x &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a_x^\dagger - a_x) \\ \hat{p}_y &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a_y^\dagger - a_y). \end{aligned} \quad (7.27)$$

Sustituyendo las ecuaciones (7.27) en (7.23) obtenemos el Hamiltoniano en función de los operadores de estos operadores.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{-\hbar\omega \left[(a_x^\dagger - a_x)^2 + (a_y^\dagger - a_y)^2 \right]}{4} + \frac{\hbar\omega \left[(a_x^\dagger - a_x)^2 * (a_y^\dagger - a_y)^2 \right]}{8} \\ &+ \frac{\beta\hbar\omega \left[(a_x^\dagger - a_x)^4 + (a_y^\dagger - a_y)^4 \right]}{16} \end{aligned} \quad (7.28)$$

El efecto de los operadores de creación y aniquilación sobre las autofunciones del operador armónico, que hemos elegido como base para resolver nuestro problema de autovalores es el siguiente

$$\begin{aligned} a_x^\dagger | \varphi_{n_x} \rangle &= \sqrt{n_x + 1} | \varphi_{n_x+1} \rangle \quad y \quad a_y^\dagger | \varphi_{n_y} \rangle = \sqrt{n_y + 1} | \varphi_{n_y+1} \rangle \\ a_x | \varphi_{n_x} \rangle &= \sqrt{n_x} | \varphi_{n_x-1} \rangle \quad y \quad a_y | \varphi_{n_y} \rangle = \sqrt{n_y} | \varphi_{n_y-1} \rangle. \end{aligned} \quad (7.29)$$

A partir de estas ecuaciones, y del Hamiltoniano escrito en función de los operadores a y a^\dagger hemos desarrollado un programa en *Fortran 90* que construye la

matriz Hamiltoniana y la diagonaliza haciendo uso de la subrutina *dsyev.f* del paquete de librerías científicas *Lapack*. La frecuencia ω del oscilador se elige de forma que la traza de la matriz H sea mínima [63]. Este procedimiento permite que obtener un número máximo de autoestados convergidos al llevar a cabo la diagonalización de la matriz H . Es importante tener en cuenta que a nivel computacional es imposible trabajar con una base infinita, y es necesario llevar a cabo un truncado de la misma a un número finito de funciones. Por tanto del total de autoestados obtenidos, aquellos con energías muy altas no son muy fiables debido al error de truncado de la base. Debido al principio variacional, y de acuerdo con el teorema de Hylleraas, Undheim y McDonald los valores propios de la matriz H obtenidos en el espacio de Hilbert restringido son aproximaciones de valor superior a las energías exactas del sistema, y la densidad de niveles en este espacio es siempre menor que en el real. Por tanto la minimización de la TrH (la suma de autovalores) es un buen criterio para elegir el ω óptimo. En nuestro caso, ω toma el valor de 1 u.a., compromiso entre el valor óptimo dado por Sugita [63] y la simplificación del cálculo computacional desarrollado.

En este trabajo hemos utilizado exclusivamente las autofunciones del sistema pertenecientes a la simetría A_1 , lo cual nos permite obtener una mayor número de funciones de base convergidas para una simetría en particular, y además resulta suficiente para nuestro propósito de construir funciones de scar en el sistema, para las órbitas lazo y cuadrado, cuya simetría corresponde a esta representación irreducible.

Para este propósito es necesario construir funciones de base adaptadas a la simetría A_1 [64]. Cuando construimos las funciones de base a partir de las autofunciones del oscilador armónico que pertenecen a la simetría adecuada la ecuación (7.24) se convierte en

$$\phi_{n_x, n_y}(x, y)_{A_1} = \sum_{n_x, n_y}^f c'_{n_x, n_y} \frac{\varphi_{n_x, n_y}(x, y) + \varphi_{n_x, n_y}(x, y)}{\sqrt{2(1 + \delta_{n_x, n_y})}} \quad (7.30)$$

En nuestro caso trabajamos con 1275 funciones de base, de las cuales las 200 primeras están perfectamente convergidas en comparación con las obtenidas a partir de una base de 2926 funciones, con variaciones en torno al tercer decimal para las últimas funciones. No hemos considerado oportuno utilizar una base mayor debido al alto coste computacional que supondría trabajar con ella a la hora de estudiar la dinámica de las funciones de scar del sistema, aunque nos limita a la hora de trabajar a energías mayores de 90 u.a., ya que los autoestados obtenidos no serán fiables debido al error de truncado de la base. Haciendo uso de la base adaptada a la simetría A_1 , construimos nuestra nueva matriz H con los operadores

Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)
1	0.56323	6	5.25843	11	9.30551	16	12.7904
2	1.88478	7	6.21255	12	10.0871	17	13.1403
3	2.86379	8	7.41148	13	10.6636	18	14.2977
4	3.85629	9	7.90522	14	11.4518	19	14.7139
5	4.82859	10	8.69471	15	11.9595	20	15.0026

Cuadro 7.1: *Energías de los veinte primeros estados de simetría A_1 del sistema cuártico*

de creación y aniquilación, y utilizando nuestro código desarrollado en Fortran 90, resolvemos el problema de autovalores. En la figura (7.2) y en la tabla (7.1) se recogen las 20 primeras funciones de onda de simetría A_1 del sistema y sus correspondientes energías. En la figura (7.2) se observa cómo las correspondientes funciones de onda no presentan líneas nodales en los ejes ni en las diagonales, propiedad característica de la simetría A_1 . En el apéndice D se presentan las 160 primeras de autofunciones y energías de simetría A_1 del oscilador cuártico, que son las que resultan fiables al nivel de cálculo empleado (energías hasta 90 u.a.).

7.3. Funciones de scar en el oscilador cuártico. Órbita cuadrada

En esta sección vamos a proceder a la construcción de las funciones de scar del sistema sobre una órbita periódica determinada, en este caso la órbita cuadrada de la figura (7.1-e), a partir de la expresión obtenida en la sección 4.2

$$\Psi_{E_{EBK}}(\mathbf{q}) = \int_0^T e^{iE_{EBK}t/\hbar} \psi(\mathbf{q}, t) dt \quad (7.31)$$

donde T es el periodo de la órbita, y E_{EBK} es la energía cuantizada según la condición EBK para la cual obtenemos la órbita periódica del sistema, y $\psi(\mathbf{q}, t)$, tiene la forma de la ecuación (4.51)

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B}} + i\mathbf{C}|} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{q} - \mathbf{q}_t) \mathbf{A}_t (\mathbf{q} - \mathbf{q}_t) + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_t (\mathbf{q} - \mathbf{q}_t) + \frac{i}{\hbar} \gamma_t \right] \quad (7.32)$$

donde

$$\gamma_t = \frac{1}{2} \int_0^t (\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}}) dt - Ht = \frac{1}{2} \int_0^t (\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}}) dt - E_{EBK}t \quad (7.33)$$

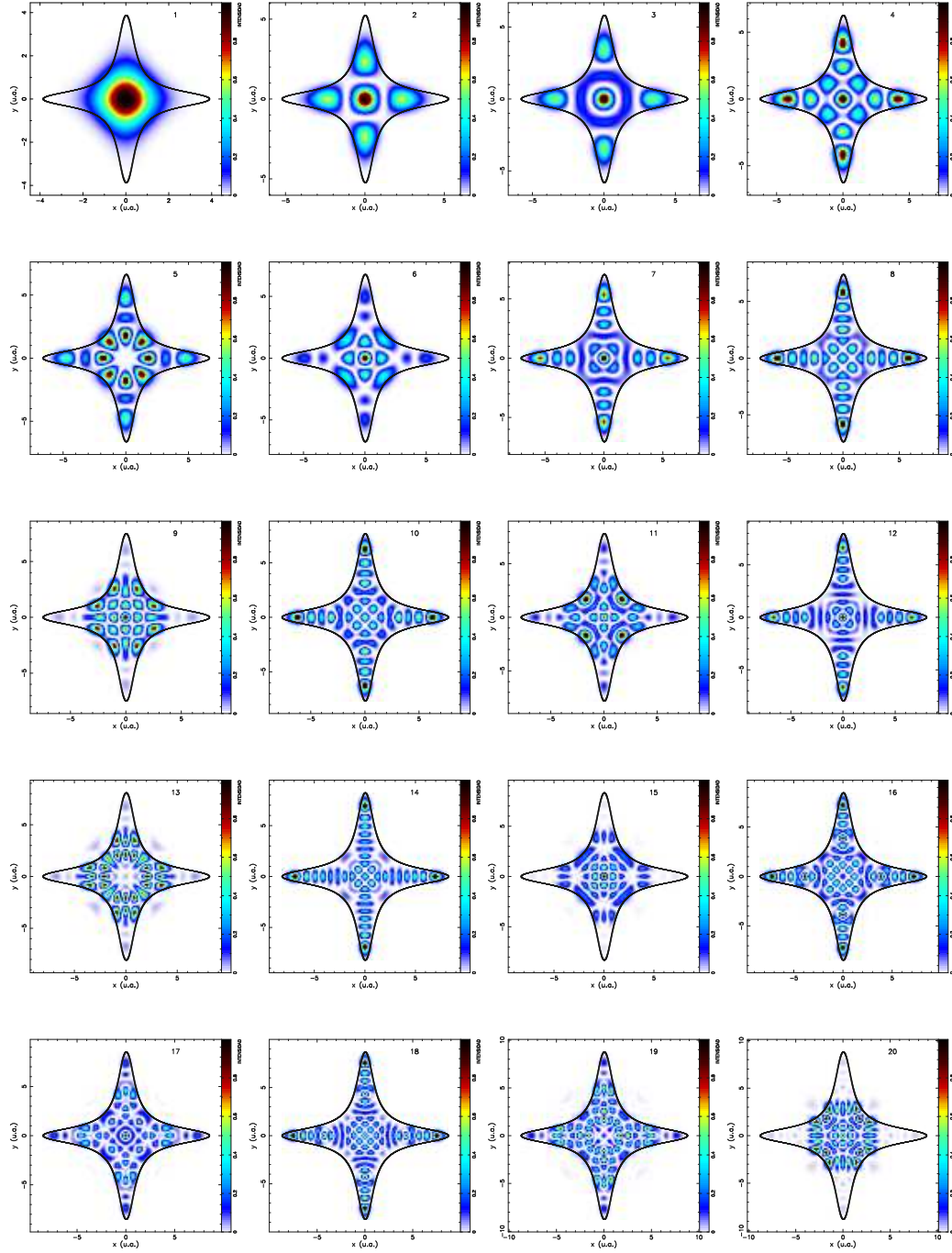


Figura 7.2: Intensidad ($|\Psi|^2$) de las primeras 20 autofunciones del sistema cuártico en el espacio de configuraciones.

con $H = E_{EBK}$, la energía a la que cuantizamos la órbita.

Para escribir la expresión definitiva a partir de la cual vamos a calcular las funciones de scar sobre la órbita, vamos a utilizar dos aproximaciones que van a simplificar enormemente los cálculos computacionales. La primera aproximación de la que hacemos uso es la llamada *Frozen Gaussian Approximation*, FGA [65]. Consiste congelar el término A_t en la expresión (7.32)

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{A}_t \quad (7.34)$$

esto implica que el paquete gaussiano se mueve a lo largo de la trayectoria clásica sin cambiar de forma, y tiene la misma posición y momento medios que la trayectoria, lo que nos garantiza, junto con el uso de las energías EBK la periodicidad del integrando en (7.31). Esto es exacto en el caso del oscilador armónico [12], para el que las fuerzas son lineares, pero en el caso general que hemos estudiado y que incluye nuestro potencial cuártico, el paquete de ondas se encuentra sometido a distorsión en su evolución. Sin embargo, esta aproximación ha demostrado ser adecuada a la hora de generar espectros, y puede aplicarse para describir procesos de fotodisociación, scattering Raman o espectros de estados excitados [65, 66].

La segunda aproximación que llevamos a cabo es la de sustituir el término de fase de la ecuación (7.33) por el propio de la aproximación WKB, y suponer que el término $\frac{1}{|\sqrt{\mathbf{B}+i\mathbf{C}}|}$ que incluye el índice de Maslov y que modifica la acción clásica evoluciona de forma lineal en el periodo, obteniendo un término

$$\exp\left[i\left(\frac{S_t}{\hbar} - \frac{\mu\pi t}{2T}\right)\right] \quad (7.35)$$

donde S_t es la acción clásica, T es el periodo de la órbita y μ es el índice de Maslov cuyo significado hemos estudiado en el apéndice A. Utilizando las ecuaciones (7.34) y (7.35) en (7.32) llegamos a la expresión que utilizaremos para calcular las funciones de scar

$$\Psi_E(x, y) \approx N \int_0^T dt \quad (7.36)$$

$$\exp\left[i\left(\frac{S_t}{\hbar} - \frac{\mu\pi t}{2T}\right) - \alpha_x(x - x_t)^2 - \alpha_y(y - y_t)^2 + \frac{i}{\hbar}p_{xt}(x - x_t) + \frac{i}{\hbar}p_{yt}(y - y_t)\right]$$

donde N es un factor de normalización, y

$$\alpha_x = \alpha_y = \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (7.37)$$

no depende del tiempo en la aproximación FGA, con lo que el paquete gaussiano no sufre distorsiones en su evolución. Además, x_t, y_t, p_{xt} y p_{yt} son las coordenadas

de la órbita periódica sobre la cual vamos a construir la función de scar desde la condición inicial hasta completar un periodo. Es importante tener en cuenta que la órbita cuadrada no es simétrica respecto a la inversión temporal, es decir, no es equivalente recorrer la órbita en el sentido horario o antihorario. Para construir correctamente la función de scar va a ser necesario sumar dos contribuciones en la ecuación (7.36): la de la órbita recorrida con sentido horario (*sh*) más la correspondiente a la recorrida en sentido antihorario (*sah*).

$$\Psi_E(x, y) = \Psi_E(x, y)_{(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t)_{sh}} + \Psi_E(x, y)_{(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t)_{sah}} \quad (7.38)$$

Para construir las funciones de scar del sistema empezamos por obtener la órbita periódica cuadrada para una energía de referencia $E_0 = 1$ u.a. Esta órbita de referencia tiene como condiciones iniciales

$$\begin{aligned} x_0 &= 1,23873792 \quad u.a. \\ y_0 &= 0 \quad u.a. \\ p_{x0} &= 0 \quad u.a. \\ p_{y0} &= 1,41004503 \quad u.a. \end{aligned} \quad (7.39)$$

La órbita periódica se obtiene a integrando las ecuaciones de Hamilton (7.1) en un periodo haciendo uso de nuestra rutina *Runge-Kutta* a orden 4. Además, se lleva a cabo simultáneamente el cálculo de la variación de la acción clásica en el periodo, integrando la ecuación (7.14), para obtener un valor de $S = 10,4568150$ u.a. A partir de esta órbita de referencia, mediante las relaciones de escalado de la ecuaciones (7.10) y (7.13) podemos obtener la órbita a cualquier energía del sistema.

Las energías a las cuales nos interesa trabajar son aquellas para las cuales la órbita periódica está cuantizada mediante la condición EBK, óptimas para el scarring [49]. La condición de cuantización EBK predice los siguientes valores para la acción clásica

$$S = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right). \quad (7.40)$$

En el sistema cuártico, debido a las características de la simetría A_1 , se determina la condición de cuantización para un cuarto del problema, y se multiplica por cuatro para obtener la condición de cuantización global. En la órbita cuadrada, para un cuarto del problema $\mu = 1^2$, y la ecuación (7.40) toma la forma

$$S_{1/4} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{4} \right) \quad (7.41)$$

²Véase el apéndice A para más información sobre el índice de Maslov y su significado.

n	E_{EBK} (u.a.)	$\Delta S(T)$ (u.a.)	λ (u.a.)	$x(0)$ (u.a.)
2	9.492136	18π	1.2549	2.174305
3	15.498811	26π	1.41181	2.457824
4	22.163541	34π	1.5507	2.687752
5	29.366473	42π	1.6639	2.883894
6	37.064710	50π	1.7635	3.056466
7	45.175668	58π	1.8529	3.211483
8	53.669289	66π	1.9344	3.352825
9	62.513847	74π	2.0096	3.483161
10	71.683477	82π	2.0796	3.604410
11	81.156618	90π	2.1451	3.718009

Cuadro 7.2: *Energía, acción clásica en un periodo, coeficiente de estabilidad λ y condiciones iniciales para la órbita cuadrada cuantizada mediante la condición EBK (7.40) con n comprendido entre 2 y 11. En el caso de la condición inicial sólo se proporciona $x(0)$, ya que en todos los casos $p_x(0) = 0$ u.a. y $y(0) = 0$ u.a., y $p_y(0)$ puede obtenerse a partir de $x(0), y(0), p_x(0)$ y E .*

que multiplicada por cuatro nos lleva a la expresión definitiva

$$S = 2\pi\hbar (4n + 1). \quad (7.42)$$

A partir de (7.40) obtenemos las acciones clásicas cuantizadas, y con las ecuaciones (7.10) y (7.13) determinamos en primer lugar la energía y la órbita correspondiente a $n = 2$, y a continuación las correspondientes a los siguientes excitados incrementados cada vez en una unidad: $n = 3, n = 4 \dots$ hasta $n = 11$. Más allá de $n = 11$ las energías cuantizadas superan 90 u.a., energía a partir de la cual las autofunciones calculadas para el sistema cuártico dejan de ser fiables y por tanto también las funciones de scar construidas.

En el cuadro (7.2) se recogen la energía, variación de la acción clásica en un periodo, coeficiente de estabilidad y condiciones iniciales periodo para las órbitas periódicas obtenidas con n comprendido entre 2 y 11. Recordamos que el dato del coeficiente de estabilidad indica el grado de inestabilidad de un órbita periódica hiperbólica (inestable). Más tarde, retomaremos estos valores y explicaremos su obtención con mayor detalle.

Una vez obtenidas las trayectorias, podemos resolver la integral (7.38) con (7.36) que nos da la función de scar. Para visualizar estas funciones, definimos una malla

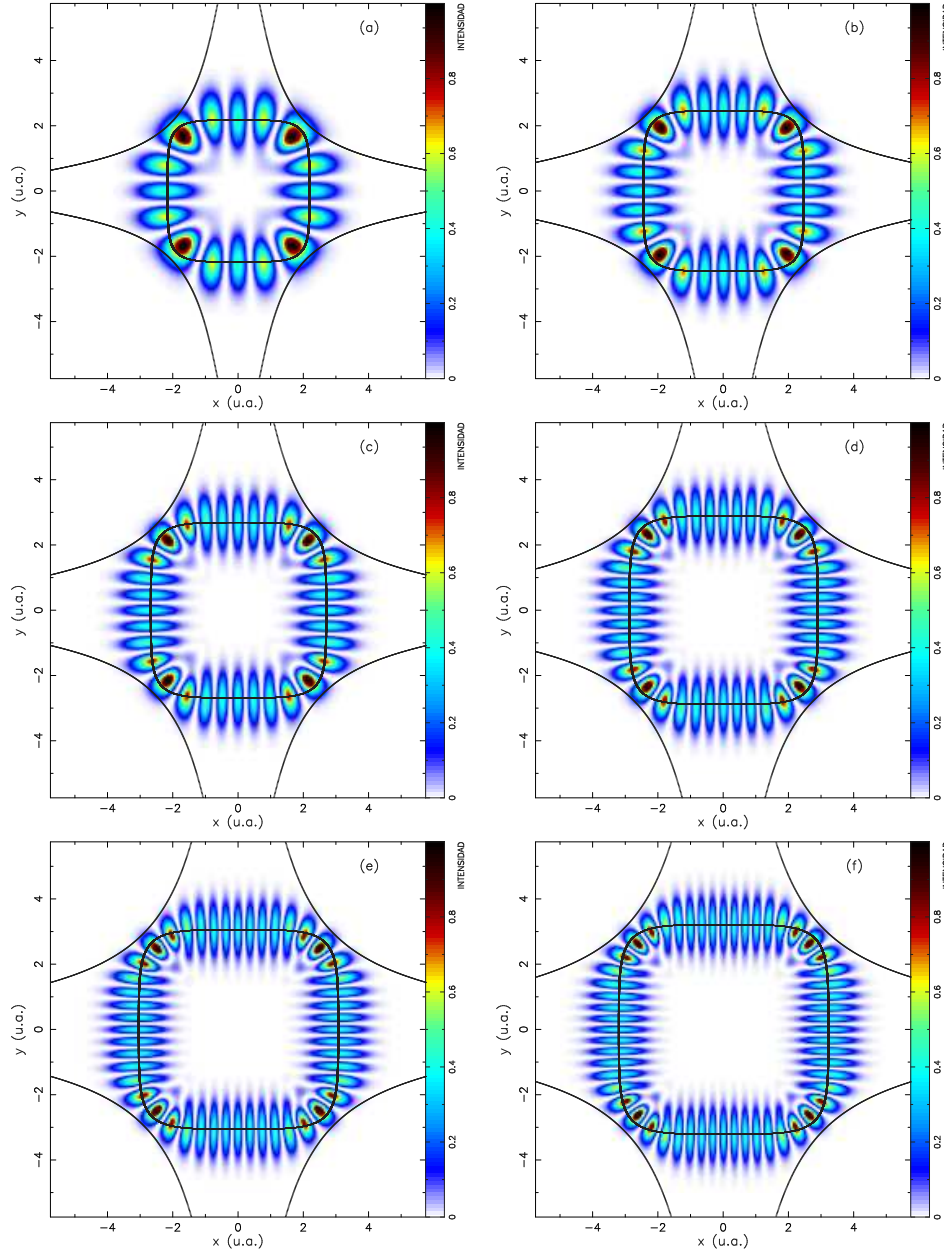


Figura 7.3: *Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita cuadrada cuantizada a partir de la condición EBK en el espacio de configuraciones. (a) $n = 2$, (b) $n = 3$, (c) $n = 4$, (d) $n = 5$, (e) $n = 6$, (f) $n = 7$,*

en el espacio de configuraciones (x, y) , e integramos numéricamente (7.38) en la variable temporal mediante el método de Simpson con los datos de la órbita periódica correspondiente a cada n para cada punto de la malla. En las figuras (7.3)

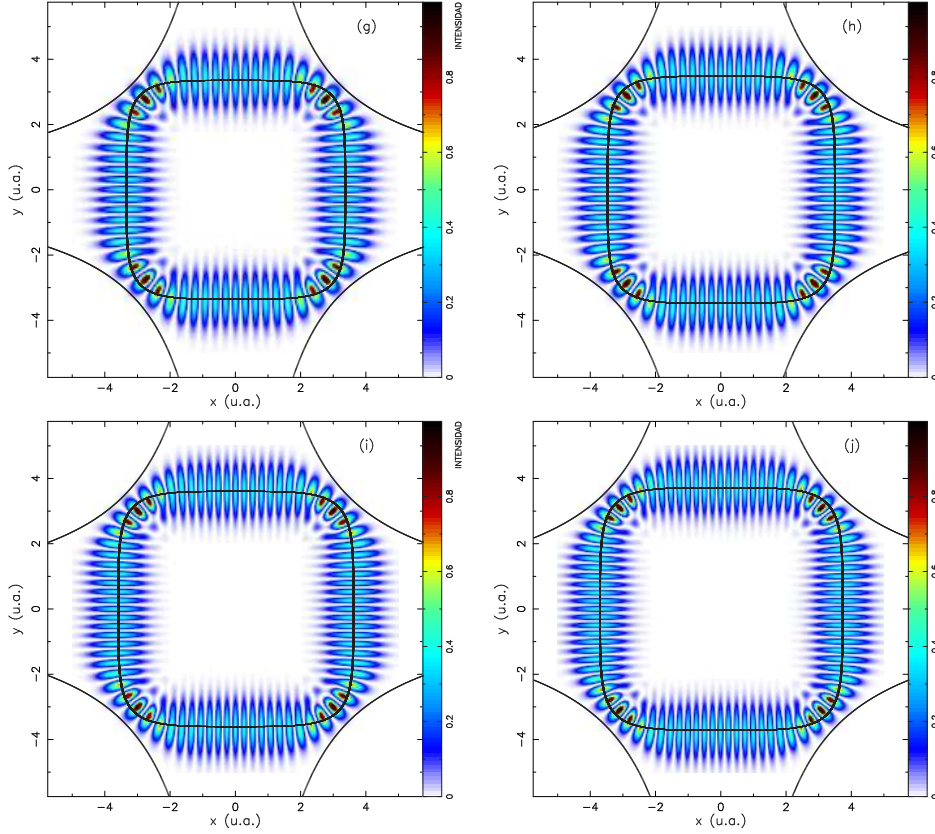


Figura 7.4: *Cont. fig. (7.3) Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita cuadrada cuantizada a partir de la condición EBK en el espacio de configuraciones. (g) $n = 8$, (h) $n = 9$, (i) $n = 10$, (j) $n = 11$*

y (7.4) recogemos las funciones de scar obtenidas para n comprendido entre 2 y 11. Para cada función de scar utiliza una malla de 200×200 a la hora de calcular la integral.

7.3.1. Espectroscopia del sistema cuártico. Espectro de resolución infinita

A través del estudio del espectro del sistema podemos obtener mucha información acerca de la dinámica clásica subyacente como hemos estudiado en la sección 5.1. Como hemos visto en la ecuación (5.6) del capítulo dedicado a la espectroscopia, el espectro de resolución infinita viene dado por

$$I(E) = \sum_n |\langle \phi_n | \Psi_{E_{EBK}}(0) \rangle|^2 \delta(E - E_{\phi_n}) \quad (7.43)$$

donde $|\phi_n\rangle$ son las autofunciones del sistema cuártico que hemos obtenido tras diagonalizar la función hamiltoniana, con la forma de la ecuación (7.30), y $\Psi_{EBK}(0)$ (ecuación 7.36) es la función de scar obtenida a partir de la órbita cuadrada obtenida para una energía cuantizada con la condición EBK. Así, para cada una de las energías EBK de la órbita periódica obtendremos el espectro de la función de scar correspondiente. La obtención de los coeficientes $\langle\phi_n|\Psi_{EBK}(0)\rangle$ en la ecuación (7.43) se ha llevado a cabo de forma numérica utilizando un esquema de integración de Gauss-Hermite en las variables x e y , y de Simpson en la variable t , con la base de 1275 funciones de onda calculada para el sistema cuártico y para una ventana de energías comprendida entre $E_{EBK} - 10$ u.a y $E_{EBK} + 10$ u.a. La elección de esta ventana está justificada, ya que como hemos visto en la sección 5.3.4 el espectro obtenido estará centrado en la energía de trabajo y sólo los autoestados cuyas energías se encuentren en torno a ella tendrán una contribución significativa. Para garantizar la validez de la ventana empleada, nos hemos asegurado de que

$$\int_{E_{EBK}-10u.a.}^{E_{EBK}+10u.a.} I(E)dE \geq 0,99 \quad (7.44)$$

Un objetivo a medio plazo es el de desarrollar el esquema computacional de integración en x e y de forma analítica, lo que supondría un importante ahorro de tiempo de computación y la posibilidad de incrementar el tamaño de la base.

Utilizando como ejemplo la órbita cuantizada para $n = 6$ ($E_{EBK} = 37,0647$ u.a.) representamos en la figura (7.5) el espectro obtenido. En la figura se pueden observar las funciones de onda asociadas a cada banda. Las seis autofunciones ϕ que contribuyen de forma mayoritaria a la función de scar corresponden a las autofunciones número 63, 65, 66, 67, 68 y 71 del oscilador cuártico, que se recogen

Estado	Energía (u.a.)	$\langle\phi \Psi_E(0)\rangle$
63	35.9824	0.41347456
65	36.3327	0.319795959
66	36.9031	0.485021366
67	37.5196	-0.407964961
68	37.9145	0.381457416
71	39.0833	-0.240233971

Cuadro 7.3: Energías de los seis estados que participan mayoritariamente en la función de scar sobre la órbita cuadrada para $n = 6$, junto con sus coeficientes de participación.

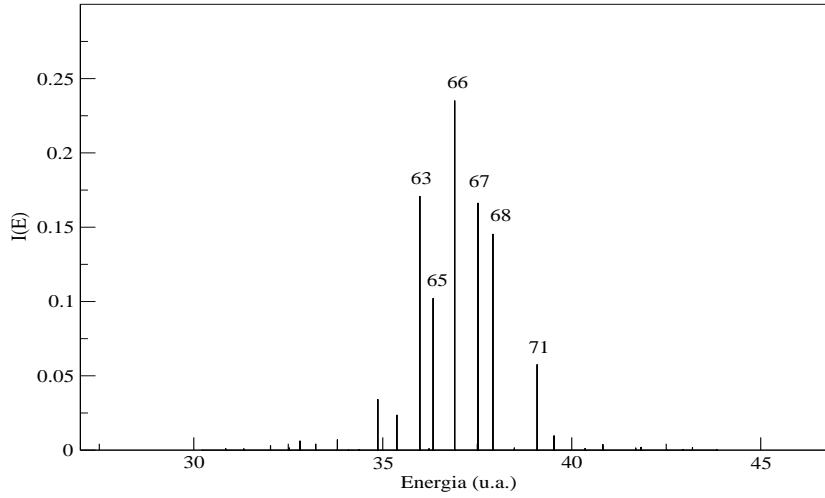


Figura 7.5: *Espectro de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 6$*

en la figura (7.6). En el cuadro (7.3) se recogen además sus energías y sus coeficientes de participación $\langle \phi | \Psi_E(0) \rangle$ en el espectro. La figura (7.7) recoge también la función de scar construida esta vez por combinación lineal de los seis estados anteriores con sus coeficientes $\langle \phi | \Psi_E(0) \rangle$. Observando las funciones de la figura (7.6) podemos constatar que ninguna de ellas muestra una localización preferente sobre la órbita cuadrada; es el efecto de la combinación lineal con los coeficientes adecuados el que localiza la función de scar resultante sobre la órbita cuadrada. Por tanto en el caso de las funciones de scar que estamos estudiando, *la densidad cuántica no se localiza sobre un único autoestado individual* del sistema, como ocurría en el caso originalmente estudiado por Heller [7, 12], *sino sobre una combinación lineal de autofunciones del sistema* cuyos coeficientes pueden determinarse simplemente a partir del espectro de resolución infinita (7.43) del scar.

Por último, en la figura (7.8) se recoge el espectro completo obtenido al superponer los resultados obtenidos para la ecuación (7.43) para las funciones de scar cuantizadas para los n comprendidos desde $n = 2$ hasta $n = 11$ respectivamente. Este espectro está en perfecto acuerdo con el obtenido por Polavieja *et al* a partir de las funciones de scar construidas con el método descrito en [10].

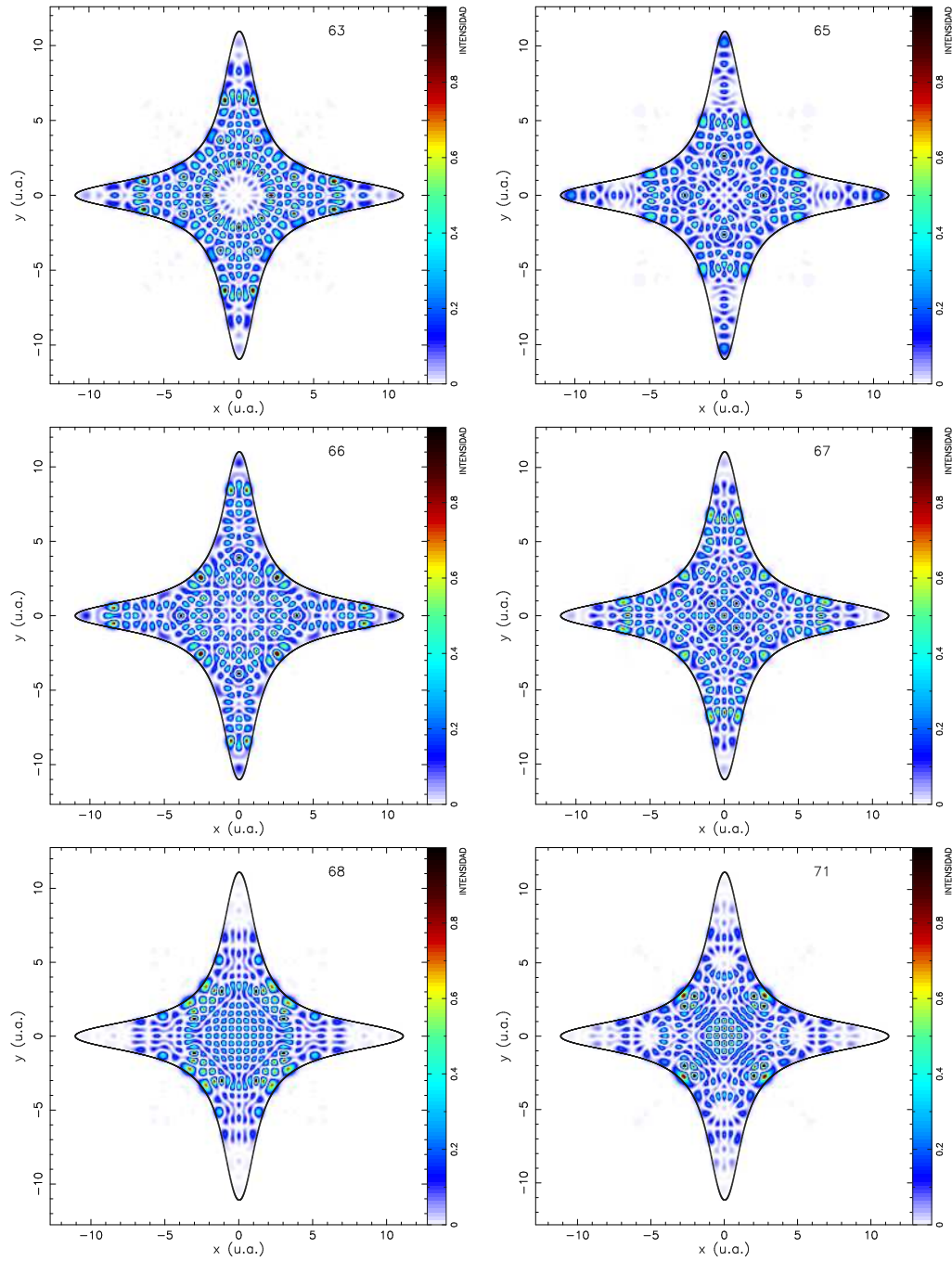


Figura 7.6: Autofunciones del estado cuártico que participan en mayor medida en la combinación lineal que da lugar a la función de scar sobre $n = 6$. (a) Estado 63; (b) Estado 65; (c) Estado 66; (d) Estado 67; (e) Estado 68; (f) Estado 71.

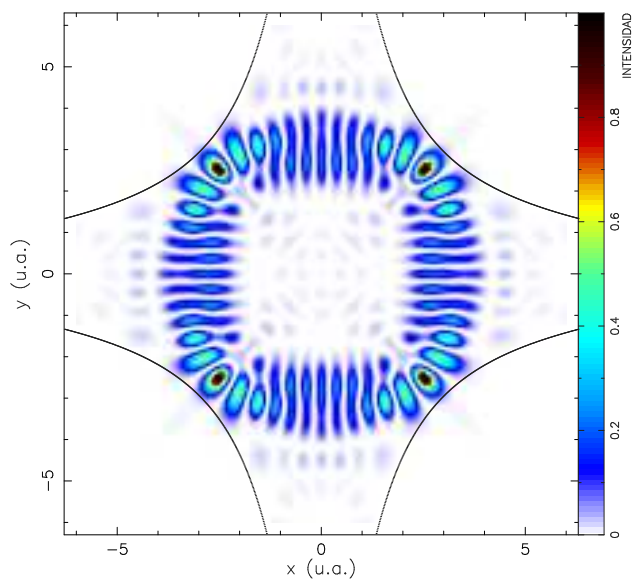


Figura 7.7: Función de scar sobre la órbita cuadrada para $n = 6$ construida a partir de la combinación lineal de las funciones de la figura (7.6)

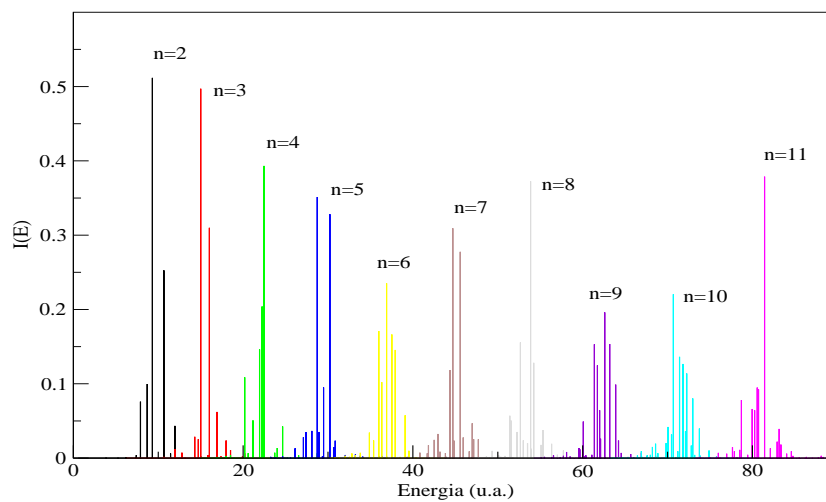


Figura 7.8: Espectro de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 2 - 11$

7.3.2. Espectroscopia del sistema cuártico. Espectro de resolución finita

Hemos estudiado en la sección 5.1 la existencia de una relación directa entre las estructuras de baja resolución de los espectros y la dinámica clásica no lineal de los sistemas excitados vibracionalmente. A continuación procedemos a buscar esta relación en los espectros de resolución finita de las funciones de scar construidas sobre la órbita cuadrada. Para obtener nuestro espectro suavizado, aplicamos en el espectro de resolución infinita $I(E)$ una ventana temporal mediante un pulso sinusoidal $W_\Delta(t)$, como veíamos en la sección 5.3.3. Recordamos que un pulso sinusoidal tenía la forma

$$W_\Delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < -\Delta t \\ \cos\left(\frac{t\pi}{2\Delta t}\right) & \text{si } -\Delta t \leq t \leq \Delta t \\ 0 & \text{si } \Delta t < t \end{cases} \quad (7.45)$$

y nos permitía obtener un espectro suavizado

$$I_{\Delta t}(E) = \frac{1}{2\hbar\Delta t} \sum_n |\langle \phi_n | \psi(0)_{E_{EBK}} \rangle|^2 \frac{\cos[\Delta t(E - E_{\phi_n})/\hbar]}{(\pi/2\Delta t)^2 - [(E - E_{\phi_n})/\hbar]^2}. \quad (7.46)$$

A partir de la ecuación (7.46) vamos a obtener nuestro espectro de resolución finita. Recordamos que ϕ_n son las autofunciones del sistema cuártico, E_{ϕ_n} su correspondiente energía, y $\psi(0)_{E_{EBK}}$ la función de scar obtenida para la órbita cuadrada a una energía cuantizada E_{EBK} . El hecho de obtener un espectro suavizado implica estudiar la dinámica de las funciones de scar hasta un tiempo igual al Δt empleado en la ecuación (7.46). La cuestión que se nos plantea en este momento es la siguiente: ¿qué Δt debemos elegir para calcular $I_{\Delta t}(E)$ de modo que podamos estudiar las relaciones existentes entre las estructuras clásicas del sistema y nuestras funciones de scar? La respuesta a esta pregunta nos la da el llamado *tiempo de Ehrenfest*. El tiempo de Ehrenfest, τ , es el límite superior para el cual un paquete de ondas mecanocuántico puede describirse resolviendo ecuaciones clásicas del movimiento sin hacer uso de construcciones semiclásicas [67]. En el caso de sistemas caóticos, el tiempo de Ehrenfest puede expresarse de forma aproximada como

$$\tau \approx \frac{1}{\lambda} \ln \left(\sqrt{\frac{S}{\hbar}} \right) \quad (7.47)$$

donde λ es el coeficiente de estabilidad de la órbita y S es una acción característica del sistema, habitualmente se toma la variación de la acción en el periodo de la órbita periódica más corta del sistema a la energía de trabajo [67]. El tiempo de Ehrenfest va a indicarnos el Δt ideal a la hora de definir la ventana para nuestro

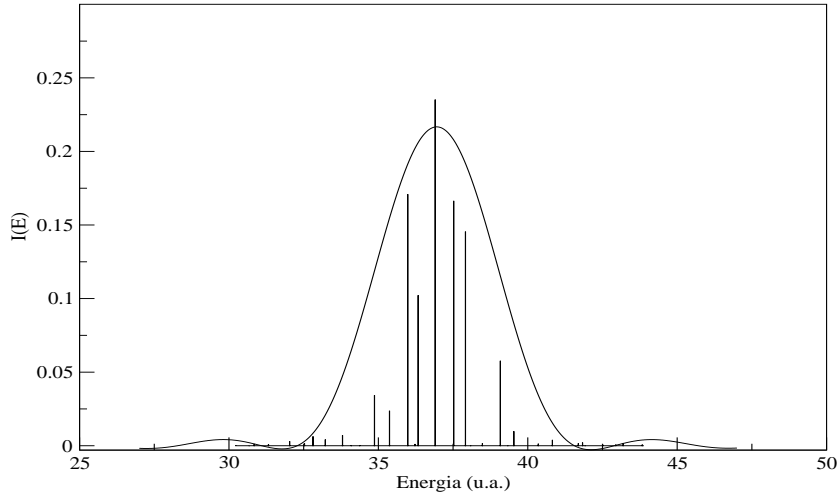


Figura 7.9: *Espectro suavizado de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 6$. Las líneas verticales corresponden al espectro de resolución infinita.*

espectro de resolución finita y establecer relaciones entre la mecánica cuántica del sistema y la mecánica clásica subyacente.

Vamos a utilizar un valor aproximado para el tiempo de Ehrenfest, $\tau = 1,3$ u.a., con el cual vamos determinar el Δt para calcular el espectro suavizado del sistema. Para llegar a este valor hemos determinado la variación ΔS en un periodo de la órbita periódica más corta del sistema, la órbita diagonal (figura 7.1-a) para la energía correspondiente a $n = 6$, obteniendo un valor de $\Delta S_{n=6} = 124,5$ u.a. Utilizando la ecuación (7.47) con el dato de $\lambda_{n=6}$ que se puede consultar en la tabla (7.2), llegamos a un valor de $\tau = 1,37$ u.a. Utilizando la relación de escalado (7.11) podemos obtener el tiempo de Ehrenfest para el resto de energías cuantizadas que oscilan entre $\tau \approx 1,6$ u.a. para $n = 3$ y $\tau \approx 1,1$ u.a. para $n = 11$. Como la ecuación (7.47) no es más que una aproximación, para simplificar el estudio trabajamos con un tiempo aproximado de Ehrenfest de $\tau = 1,3$ u.a., que es una media de los valores extremos obtenidos, para obtener todas las bandas suavizadas del espectro.

A continuación, recogemos en las figuras (7.9) y (7.10) los espectros suavizados correspondientes a la banda de resolución finita para $n = 6$ de la figura (7.5) y al espectro obtenido por la superposición de las bandas $n = 2$ a $n = 11$ de la figura, obtenidos utilizando la ecuación (7.8) para $\Delta t = \tau \approx 1,3$ u.a. Como cabía suponer, las bandas suavizadas se encuentran centradas en las energías dadas por

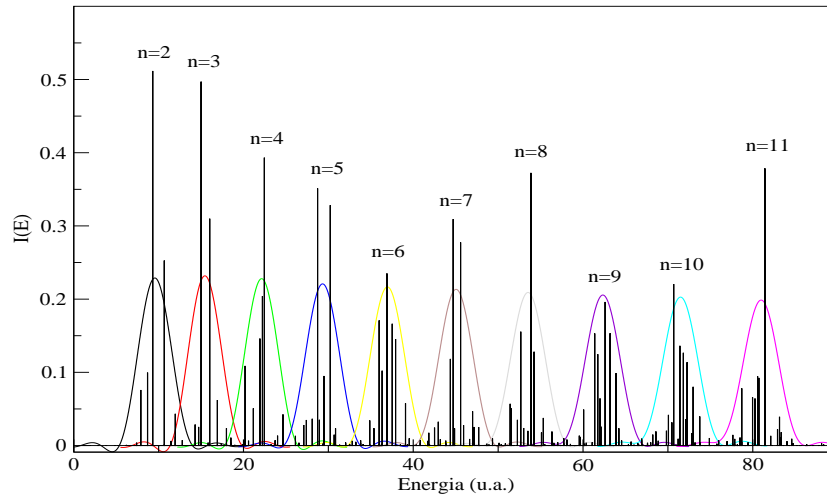


Figura 7.10: Espectro suavizado de la función de scar en la órbita cuadrada para $n = 2 - 11$. Las líneas verticales corresponden a las bandas de resolución infinita.

la condición de cuantización EBK (sección 5.3.4).

En la sección anterior hemos analizado los resultados obtenidos para el espectro de resolución infinita, que no aporta información sobre la dinámica clásica del sistema. La existencia de scars implica una regularidad en el correspondiente espectro cuántico, relacionada con el periodo de la órbita periódica. Los espectros suavizados de funciones de scar presentan bandas cuyos anchos son proporcionales al exponente de estabilidad de la órbita, centrados en las energías para las cuales la órbita está cuantizada según la condición EBK. Los trabajos de Wisnicki, Borondo, Vergini y Benito en el billar de Bunimovich ([41]) y en el sistema molecular LiCN-LiNC ([42]) estudian cómo el movimiento homoclínico clásico en estos sistemas induce fluctuaciones en los anchos de las distintas bandas espectrales de los espectros de resolución finita correspondientes a funciones de scar localizadas sobre órbitas periódicas inestables respecto a los esperados en relación a su periodo y coeficiente de estabilidad. En ambos trabajos se demuestra que estas fluctuaciones en los anchos de banda presentan un comportamiento oscilante muy sencillo en términos de las áreas homoclínicas definidas por las variedades estable e inestable del sistema. A continuación, vamos a estudiar la estructura hiperbólica del sistema en torno a la órbita periódica cuadrada y las áreas que definen las variedades estables e inestables al cortarse entre sí. Una vez conocidas las características de la estructura hiperbólica clásica, calcularemos a partir de la ecuación

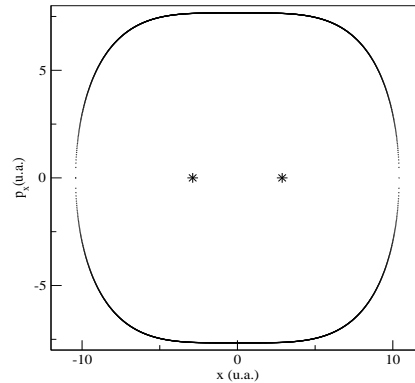


Figura 7.11: *Superficie de sección de Poincaré $y = 0$ para la órbita cuadrada del oscilador cuántico con $n = 5$. Las estrellas marcan la posición de los puntos fijos de la órbita*

(7.46) los anchos de las bandas del espectro suavizado obtenido para el tiempo de Ehrenfest (Figura 7.10), e intentaremos relacionar las fluctuaciones de los anchos de banda con dicha estructura clásica. Para ello, lo ideal sería contar con el mayor número de bandas posibles, pero las limitaciones de nuestra base que nos obligan a trabajar a energías menores de 90 u.a. hacen que debamos restringirnos al estudio de 10 bandas.

Estructura hiperbólica de la órbita cuadrada

En esta sección vamos a construir la estructura hiperbólica existente alrededor de la órbita cuadrada cuantizada con $n = 5$, y por tanto $E = 29,366473$ u.a. Las leyes de escalado (7.10), (7.13) y (7.11) nos permitirán extrapolar los resultados a cualquier otro valor de n .

A la hora de describir la estructura hiperbólica en torno a la órbita, debemos comenzar por escoger una superficie de sección de Poincaré adecuada en la que dibujar las variedades estables e inestables (sección 2.2). Una elección sencilla es escoger el plano $[x, p_x]$, fijando $y = 0$, y $p_y > 0$. Esto, junto con el valor de la energía nos permite expresar el módulo de p_y en función del resto de variables, con lo que la representación de la SSP nos dará una información completa de la dinámica del sistema para $y = 0$ a la energía fijada.

En primer lugar, vamos a dibujar la SSP para la órbita cuadrada. Como es lógico, y si observamos su representación en el espacio de configuraciones (figura

7.1-e), en la SSP obtenida para $y = 0$, aparecerán dos únicos puntos fijos, correspondientes a los dos cortes de la órbita periódica con el eje de abscisas. En la figura (7.11) recogemos esta SSP, en la que dibujamos también las fronteras fuera de las cuales no es posible el movimiento clásico. Para dibujar estas fronteras, a la energía de trabajo E y con $y = 0$, hemos escrito, a partir de la ecuación (7.1)

$$p_x = \sqrt{2m \left(E - \frac{p_y^2}{2m} - \frac{\beta_{cl} x^4}{4} \right)} \quad (7.48)$$

Como lo que buscamos es dibujar en el plano $[x, p_x]$ el valor máximo de p_x para cada x posible, debemos fijar en la ecuación (7.48) $p_y = 0$. Llevando a cabo un barrido en x , obtenemos los p_x correspondientes a la frontera dinámica clásica.

A continuación vamos a obtener la estructura hiperbólica en torno a los dos puntos fijos definidos por la órbita periódica en la superficie de sección. Para ello comenzamos por obtener la matriz de estabilidad transversal $\mathbf{M}^\perp(T)$ (ecuación 2.34) que gobierna el movimiento hiperbólico en la superficie de sección. T es el periodo de la órbita cuadrada. Para calcular $\mathbf{M}^\perp(T)$ utilizamos la teoría de dinámica linealizada de la sección (2.2), y en particular la ecuación (2.25). El cálculo de los elementos de matriz, las derivadas parciales $\frac{\partial x(t)}{\partial x_0}$, $\frac{\partial x(t)}{\partial p_0}$, $\frac{\partial p(t)}{\partial x_0}$ y $\frac{\partial p(t)}{\partial p_0}$ para la ecuación (2.25), se lleva a cabo definiendo cuatro condiciones iniciales muy próximas a la del punto fijo de la órbita periódica en la superficie de sección, cuyas coordenadas son $(x, p_x) = (2,883890, 0)$ u.a:

$$x_1 = x - \Delta x \quad ; \quad p_{x1} = p_x \quad (7.49)$$

$$x_2 = x + \Delta x \quad ; \quad p_{x2} = p_x \quad (7.50)$$

$$x_3 = x \quad ; \quad p_{x3} = p_x - \Delta p_x \quad (7.51)$$

$$x_4 = x \quad ; \quad p_{x4} = p_x + \Delta p_x \quad (7.52)$$

donde tomamos $\Delta x = 0,00001$ u.a. y $\Delta p_x = 0,00002$ u.a. En todos los casos $y = 0$, y el valor de p_y queda automáticamente fijado con los valores de x , y , p_x y E

A partir de las condiciones iniciales se calcula la trayectoria a la que da lugar cada una de ellas hasta que vuelven a cruzar la superficie de sección, con las coordenadas (x_{1f}, p_{x1f}) , (x_{2f}, p_{x2f}) , (x_{3f}, p_{x3f}) y (x_{4f}, p_{x4f}) . En este momento estamos

en disposición de calcular una aproximación a las derivadas anteriores como

$$\frac{\partial x(t)}{\partial x_0} \approx \frac{\Delta x(t)}{\Delta x_0} = \frac{x_{2f} - x_{3f}}{x_2 - x_3} \quad (7.53)$$

$$\frac{\partial x(t)}{\partial p_0} \approx \frac{\Delta x(t)}{\Delta p_0} = \frac{x_{2f} - x_{3f}}{p_2 - p_3} \quad (7.54)$$

$$\frac{\partial p(t)}{\partial x_0} \approx \frac{\Delta p(t)}{\Delta x_0} = \frac{p_{2f} - p_{3f}}{x_2 - x_3} \quad (7.55)$$

$$\frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \approx \frac{\Delta p(t)}{\Delta p_0} = \frac{p_{2f} - p_{3f}}{p_2 - p_3} \quad (7.56)$$

$$(7.57)$$

Como hemos visto en la sección (2.2), el determinante de la matriz de estabilidad es siempre la unidad. Por tanto, para garantizar que nuestra aproximación a los elementos de matriz es bueno, el determinante de la matriz \mathbf{M}^\perp que calculamos debe aproximarse lo máximo posible a un valor de uno. En nuestro caso obtenemos una matriz de estabilidad

$$\mathbf{M}^\perp(T) = \begin{pmatrix} 133,0926 & 54,7501 \\ 323,5177 & 133,0925 \end{pmatrix} \quad (7.58)$$

cuyo determinante $|\mathbf{M}^\perp(T)| = 1,0003$ u.a. se aproxima adecuadamente al valor unidad buscado. A partir de la matriz $\mathbf{M}^\perp(T)$ podemos calcular sus autovalores η_\pm , mediante la ecuación (2.37). Los valores obtenidos, $\eta_+ = 266,18144$ u.a. y $\eta_- = \frac{1}{\eta_+} = 0,00375804126$ u.a. nos permiten comprobar que, efectivamente, la órbita cuadrada con la que trabajamos es del tipo hiperbólico, y además podemos calcular coeficiente de estabilidad λ usando (2.40)

$$\lambda = 1,6639 \quad \text{u.a.} \quad (7.59)$$

A partir de este valor del coeficiente de estabilidad para la órbita cuadrada con $n = 5$, la regla de escalado (7.11)³ nos permite obtener el valor de λ para cualquier n . Estos valores son los que se encuentran tabulados en el cuadro (7.2).

Hasta aquí hemos estudiado el significado de los autovalores de la matriz $M^\perp(T)$. Ahora, vamos a centrarnos en el análisis de sus autovectores v_\pm .

$$\begin{aligned} v_+ &= (0,3804459, 0,92480316) \quad \text{u.a.} \\ v_- &= (0,3804458, -0,92480321) \quad \text{u.a.} \end{aligned} \quad (7.60)$$

La ecuación (2.43) nos dice que cualquier punto a lo largo de la línea $(x, P_x) = n_c v_+$, siendo n_c una constante de proporcionalidad, permanece en esta línea alejándose exponencialmente de la órbita periódica por la variedad inestable, hasta

³El coeficiente de estabilidad tiene dimensiones de T^{-1}

abandonar la región en la que es aplicable la dinámica linearizada, cuando la variedad se curva. Asimismo, cualquier punto a lo largo de la línea $(x, P_x) = n_c v_-$ permanece sobre ella acercándose exponencialmente a la órbita periódica por la variedad estable.

Podemos calcular numéricamente la variedad inestable tomando el punto fijo de la órbita y alejándolo de él con $n_c v_+$, siendo n_c un número muy pequeño. Hacemos evolucionar el punto p_0 obtenido hasta el primer corte p_1 con la SSP. Cogemos ahora intervalo de la superficie de sección definido por p_0 y p_1 y colocamos a lo largo del segmento 10000 condiciones iniciales para hacer evolucionar otras tantas trayectorias hasta que cada una de ellas cruza tres veces la superficie de sección. La representación de los cortes de las 10000 trayectorias con la SSP nos permite visualizar la variedad inestable. Representando también la variedad estable, que se obtiene de forma análoga pero con v_- , llegamos a la figura (7.12), que contiene toda la estructura hiperbólica relevante para la SSP elegida. Como sucedía para las órbitas periódicas clásicas del sistema, la forma de las variedades será la misma para cualquier energía con la que trabajemos, debido a las propiedades de escalado del sistema. Por tanto, aunque trabajamos con $n = 5$, la estructura hiperbólica obtenida es idéntica para cualquier otro n .

A partir de la estructura hiperbólica del sistema, con las variedades estable e inestable que surgen de cada uno de los dos puntos fijos, vamos a calcular las áreas homoclínicas y heteroclínicas que generan estas variedades al cortarse. Estas áreas han sido construidas de forma exclusivamente clásica. En este trabajo pretendemos relacionar sus valores numéricos con los anchos del espectro de resolución finita de la función de scar que puede obtenerse, como hemos visto en la sección 7.3.2, de forma puramente cuántica a través de una combinación lineal de autofunciones del oscilador cuántico. Las áreas homoclínicas y heteroclínicas que van a tener una influencia en el espectro cuántico suavizado del sistema van a ser definidas por el primer punto de corte de la variedad estable e inestable provenientes de un mismo punto fijo (área homoclínica), y las definidas por los primeros puntos de corte entre las variedades estable e inestables provenientes de los distintos puntos fijos (áreas inestables). En este punto cabe preguntarse por qué van a ser relevantes estas áreas en particular. Sencillamente porque definen los circuitos homoclínicos y heteroclínicos más cortos: una condición inicial que parta de un punto fijo determinado volverá a éste en el menor tiempo posible cuando recorra uno de estos circuitos. A la hora de construir scars, como ya explicamos en la sección 4.1, influye el solapamiento de un paquete de ondas consigo mismo a tiempos largos, guiado por una órbita periódica. Pero también se debe tener en cuenta la densidad de función de onda que se dispersa por el sistema hiperbólico y vuelve a través del sistema homoclínico y heteroclínico para contribuir el solapamiento. Los cir-

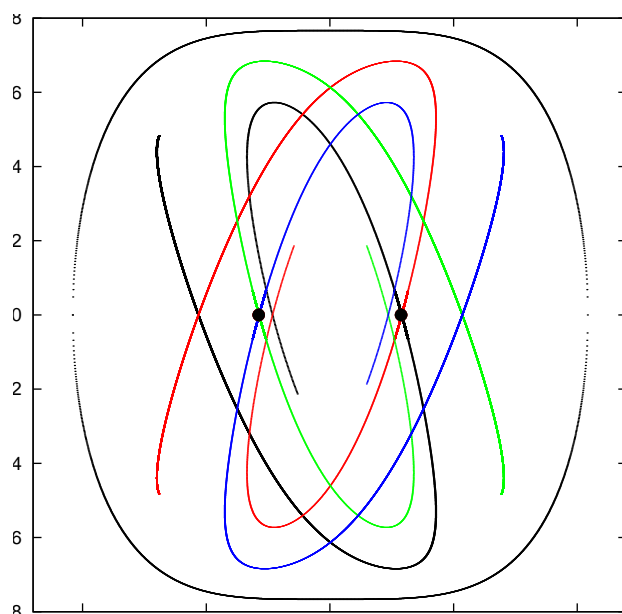


Figura 7.12: Estructura hiperbólica para la órbita cuadrada en la superficie de sección $y = 0$

circuitos homo y heteroclínicos importantes para este fenómeno serán aquellos más cortos, ya que la contribución de la densidad dispersada en circuitos más largos será mucho menor y por tanto prácticamente despreciable.

En las figuras (7.13) y (7.14) recogemos las áreas definidas por los circuitos homo y heteroclínicos más cortos y sus valores numéricos. Como es lógico trabajando en el plano $[x, p_x]$, estas áreas tendrán dimensiones de acción.

Determinación de los anchos de banda del espectro suavizado y relación con las áreas definidas por la estructura hiperbólica del sistema

A partir de la expresión (5.22) calculamos las anchuras, σ_n , de las bandas $n = 2 - 11$ del espectro de resolución finita de la función de scar para la órbita cuadrada (figura 7.10). Los resultados obtenidos se recogen en el cuadro (7.4) y se representan en la figura (7.4-a). Como únicamente nos interesa el comportamiento de las fluctuaciones en los anchos de banda, ajustamos los datos obtenidos a una parábola (figura 7.4-a) para obtener el comportamiento regular debido al periodo y coeficiente de estabilidad de la órbita periódica (ver sección 5.1) que restaremos

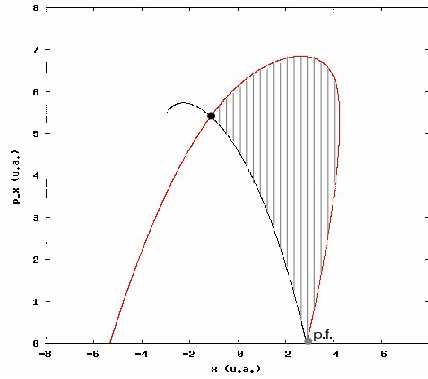


Figura 7.13: Área del circuito homoclínico más corto para la órbita cuadrada con $n = 5$ en la SSP $y = 0$. Área=18.471 u.a.

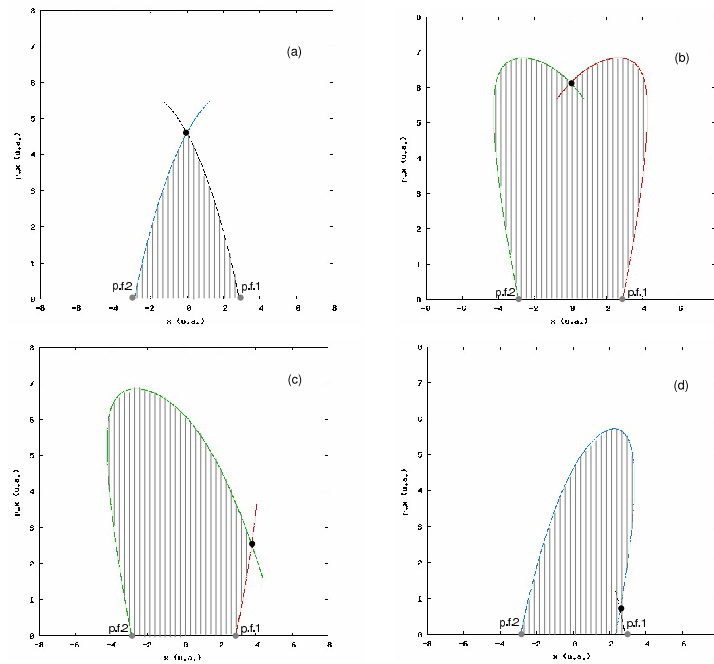


Figura 7.14: Áreas de los principales circuitos heteroclínicos para la órbita cuadrada con $n = 5$ en la SSP $y = 0$. (a) Área=15.299 u.a. (b) Área=50.652 u.a. (c) Área=41.629 u.a. (d) Área=24.320 u.a.

haciendo uso de la parábola obtenida, y aplicando la siguiente expresión

$$\sigma_{n,osc} = \sigma_n - \sigma_{parabola} \quad (7.61)$$

obtenemos las anchuras, $\sigma_{n,osc}$, que incluyen únicamente el comportamiento oscilante del ancho de banda cuyos valores numéricos se recogen en el cuadro (7.4). Pretendemos relacionar estos datos con los obtenidos para las áreas de los circuitos homo y heteroclínicos. En los trabajos de Wisniacki, Borondo, Vergini y Benito en el billar de Bunimovich y en el sistema LiCN-LiNC [41, 42] únicamente el circuito homoclínico más corto influía en la distribución de los anchos de banda del espectro suavizado. El resto de circuitos, homo y heteroclínicos eran demasiado largos y su contribución a la dinámica de la función de scar era despreciable. En nuestro caso, debido a la compleja estructura hiperbólica existente, además del circuito homoclínico, varios circuitos heteroclínicos van a intervenir en la dinámica.

Para analizar las fluctuaciones $\sigma_{n,osc}$ obtenidas y relacionarlas con las áreas homo y heteroclínicas vamos a calcular su *transformada de Fourier discreta* (DFT). La transformada de Fourier discreta se define para nuestro caso particular como

$$I\left(e^{i2\pi\frac{f}{f_s}}\right) = \sum_n \sigma_{n,osc} e^{-i2\pi n \frac{f}{f_s}} \quad (7.62)$$

donde f_s es la frecuencia de muestreo. $I(e^{i2\pi f/f_s})$ es una función continua, y además la DFT es periódica en $2\pi f/f_s$ con periodo 2π , y por tanto periódica en f con periodo f_s .

$$I\left(e^{i2\pi\frac{f}{f_s}}\right) = I\left(e^{i2\pi\frac{f}{f_s}+2\pi}\right) \quad (7.63)$$

La transformada discreta de Fourier de los anchos oscilatorios de banda, nos va a permitir obtener el espectro de sus frecuencias asociadas $I(f)$. El resultado obte-

n	σ (u.a.)	σ_{osc} (u.a.)	n	σ (u.a.)	σ_{osc} (u.a.)
2	3.693606	0.021314	7	3.615863	-0.005881
3	3.639087	-0.017721	8	3.620291	0.000574
4	3.625439	-0.018638	9	3.633739	0.013348
5	3.643232	0.009263	10	3.642894	0.019240
6	3.626601	0.000082	11	3.608027	-0.021650

Cuadro 7.4: Anchos del espectro de resolución finita con una ventana sinusoidal para $t = 1,3$ u.a.

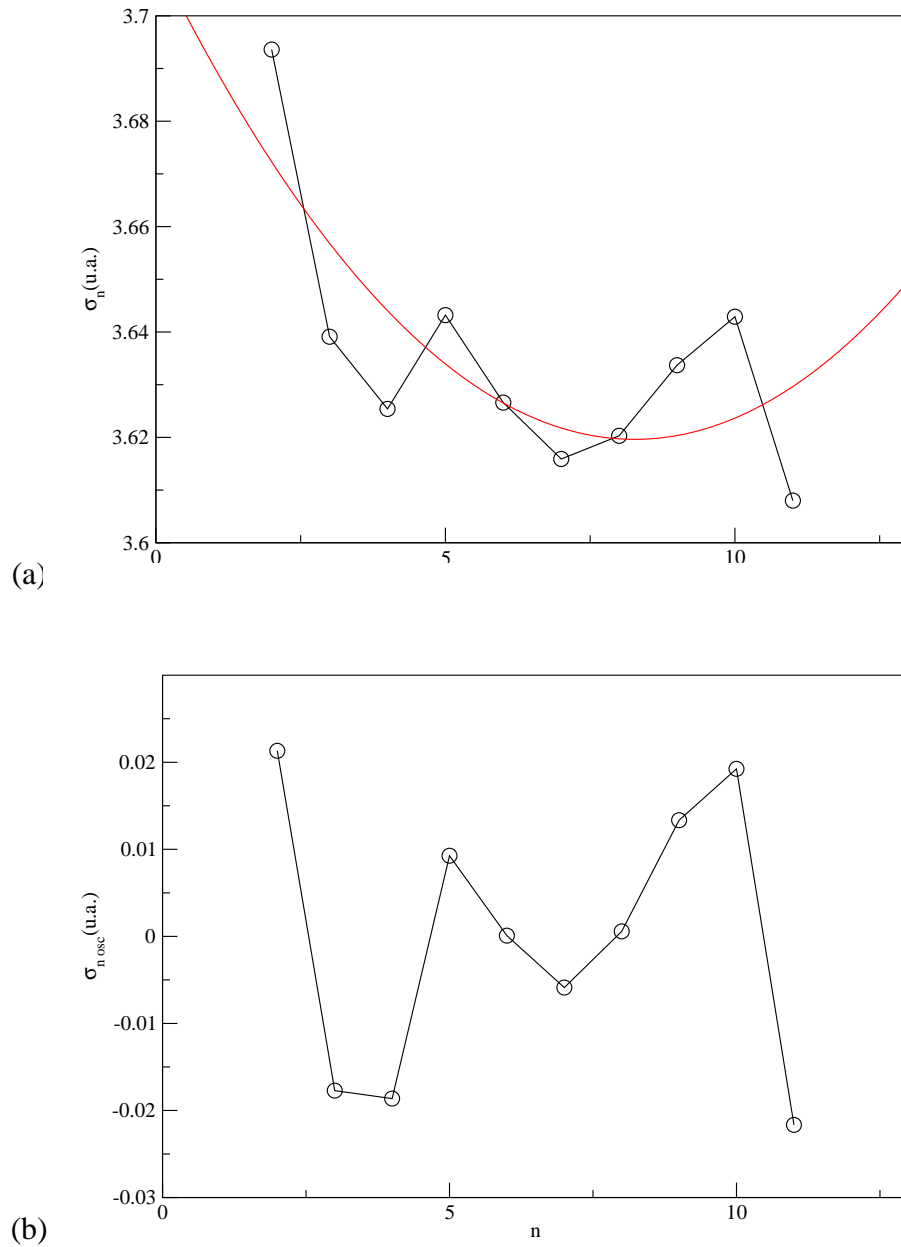


Figura 7.15: (a) Anchos de las bandas del espectro suavizado (7.10) para $\Delta t = 1,3$ u.a. (b) Oscilaciones de los anchos de banda calculadas tras restar el comportamiento regular obtenido al ajustar una parábola a los anchos representados en (a).

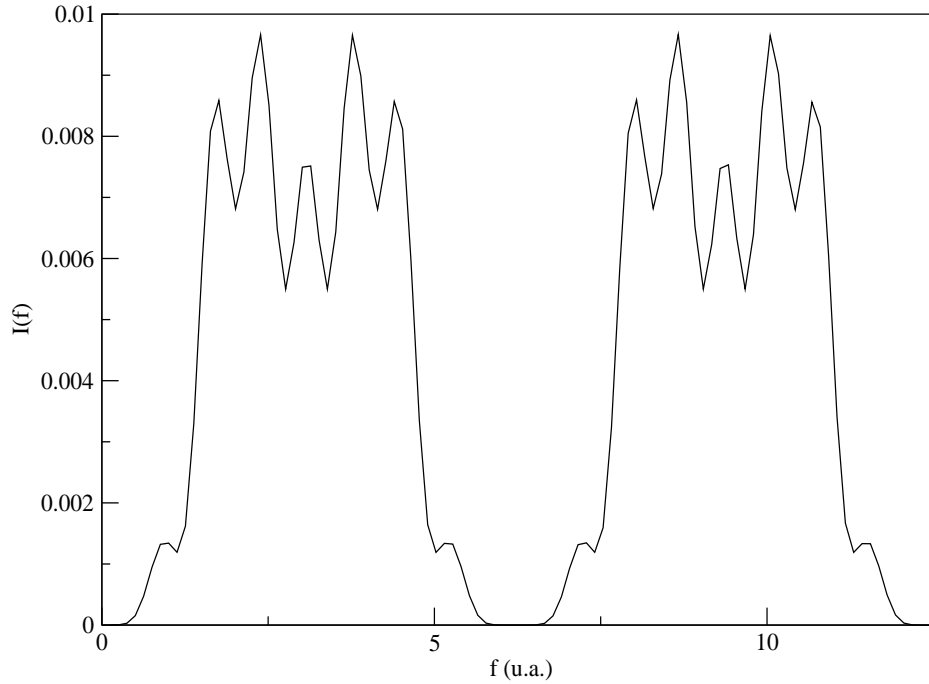


Figura 7.16: *Espectro de Fourier de los anchos de banda del espectro suavizado.*

nido utilizando $f_s = 2\pi$ se recoge en la figura (7.16). En ella se puede observar la naturaleza periódica de la transformada de Fourier discreta. Para poder relacionar las bandas del espectro de Fourier con las áreas de los circuitos homo y heteroclínicos obtenemos las frecuencias asociadas f' a dichas áreas haciendo uso de la expresión

$$S_n = hn \frac{f'}{f_s} \quad (7.64)$$

con $f'_s = 2\pi$ u.a. y recordando que hemos calculado las áreas de las figuras (7.13) y (7.14) para $n = 5$ podremos asignar al espectro de Fourier las frecuencias f' asociadas a cada área.

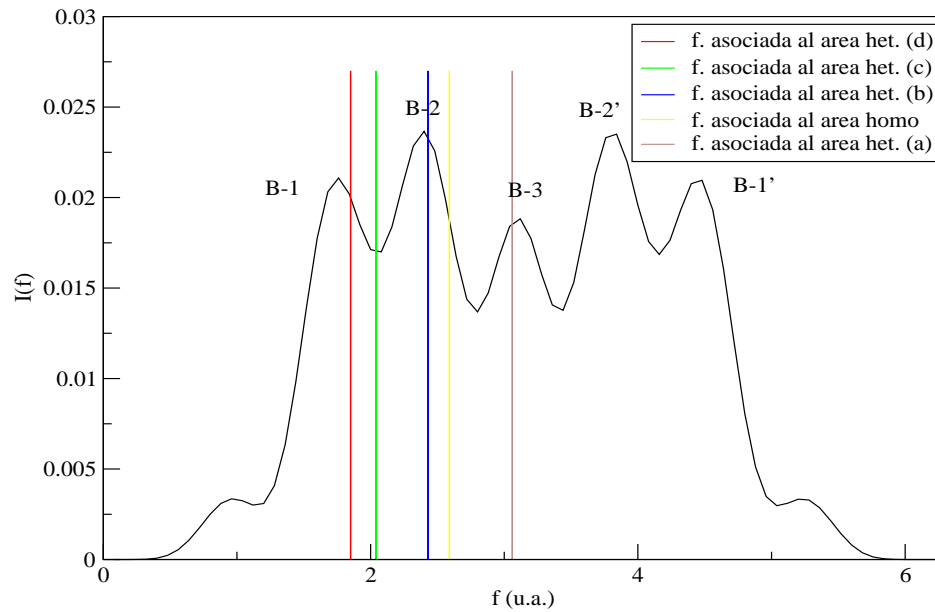


Figura 7.17: Espectro de Fourier de los anchos de banda oscilantes del espectro suavizado para $\tau = 1,3$ u.a. y frecuencias asociadas a las áreas de la estructura hiperbólica.

Área estudiada	Área (u.a.)	f (u.a.)	Espectro de Fourier
Homoclínica			
Figura (7.13)	18.471	2.59	Banda B-2
Heteroclínica			
Figura (7.14-a)	15.299	3.06	Banda B-3
Heteroclínica			
Figura (7.14-b)	50.652	2.43	Banda B-2
Heteroclínica			
Figura (7.14-c)	41.629	2.04	Banda B-1
Heteroclínica			
Figura (7.14-d)	24.320	1.85	Banda B-1

Cuadro 7.5: Áreas homo y heteroclínicas y su asignación a las bandas del espectro de Fourier

Para el caso del área heteroclínica de la figura (7.14-b) obteníamos un área de 50,652 u.a. Aplicando la ecuación (7.64) obtenemos una S asociada de $f' = 10,130$ u.a. Como la transformada discreta de Fourier es periódica en 2π este resultado es equivalente a $f' = 10,130 - 2\pi = 3,847$ u.a. La transformada de Fourier presenta además un eje de simetría en π , es equivalente trabajar con $f' = 2\pi - 3,847 = 2,436$ u.a. En cualquier caso, si superponemos el valor $f' = 2,436$ u.a en la figura (7.17) puede asignarse a la banda que hemos llamado $B - 2$ en la figura, o el de $f' = 3,847$ u.a a su banda simétrica $B - 2'$. Realizando el mismo análisis para el resto de áreas estudiadas y superponiendo los valores obtenidos en la figura (7.17) obtenemos los datos recogidos en el cuadro (7.5). Por tanto el área homoclínica de la figura (7.13) contribuye a la banda $B - 2$ el espectro de Fourier, junto con el área de la figura heteroclínica de la figura (7.14-b). Las áreas heteroclínicas de las figuras (7.14-c) y (7.14-d) generan la frecuencia correspondiente a la banda $B - 1$ del espectro de Fourier, y finalmente el área heteroclínica de la figura (7.14-a) es responsable de la banda $B - 3$.

Estos resultados permiten poner de manifiesto la relación existente entre la estructura hiperbólica del sistema, de naturaleza clásica, y los anchos del espectro suavizado de la función de scar, que puede construirse de forma puramente cuántica, si bien es cierto que la compleja estructura del sistema complica el análisis, y sería recomendable estudiar el comportamiento de los anchos del espectro de resolución finita haciendo uso de un mayor número de bandas. Para ello será necesario un tratamiento analítico de ciertas integrales que permita acortar el tiempo de cálculo, y por tanto, utilizar una base mejor para el tratamiento numérico.

Por otra parte, podría discutirse el ajuste de los anchos de banda a una parábola para poder aislar la parte correspondiente al movimiento oscilante de los anchos. Para comprobar que este ajuste está justificado, vamos a repetir todo el proceso trabajando esta vez con un tiempo un poco mayor al tiempo de Ehrenfest a la hora de obtener el espectro suavizado, $\tau = 2$ u.a. Esta manipulación implica que la densidad cuántica, al poder evolucionar durante más tiempo, además de recorrer los circuitos homo y heteroclínicos más cortos, podrá avanzar por otros más largos disminuyendo las recurrencias. Pero como no llegamos a tiempos demasiado largos, el comportamiento global de la dinámica debe ser, todavía, similar. En las figuras (7.19-a) y (7.19-b) recogemos el espectro suavizado para $\tau = 2$ u.a., y los anchos para cada banda respectivamente. En esta ocasión, observando los anchos obtenidos, no parece adecuado ajustarlos a una parábola para aislar el comportamiento oscilante del comportamiento regular, sino a una recta. Calculamos los anchos oscilantes aplicando

$$\sigma_{n,osc} = \sigma_n - \sigma_{recta} \quad (7.65)$$

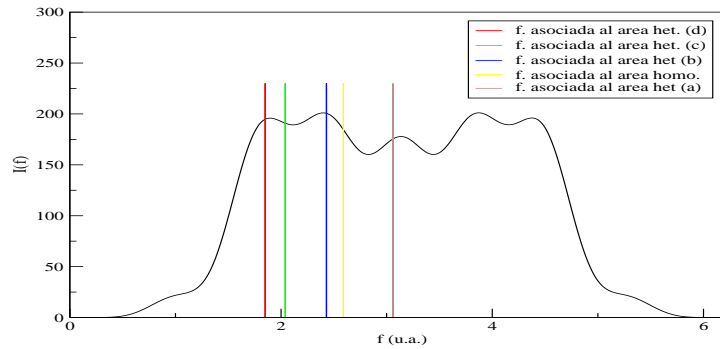


Figura 7.18: *Espectro de Fourier de los anchos de banda oscilantes del espectro suavizado para $\tau = 2$ u.a.*

y los representamos en la figura (7.19-c). Si los comparamos con los obtenidos para $\tau = 1,3$ u.a. de la figura (7.15-b) superpuestos, observamos que el comportamiento cualitativo de oscilación es prácticamente idéntico.

En el cuadro (7.6) se recogen los valores numéricos de los anchos correspondientes a cada banda del espectro suavizado para $\tau = 2$ u.a., y a su lado el valor de las fluctuaciones respecto al comportamiento regular.

Si además representamos el espectro discreto de Fourier para estos nuevos anchos oscilantes junto con las frecuencias correspondientes a las áreas de los circuitos homo y heteroclínicos (figura 7.18), comprobamos como el la estructura de bandas es muy similar y cómo coincide la asignación de las frecuencias a cada banda. Por tanto, el ajuste a una parábola de los anchos con $\tau = 1,3$ u.a. para aislar el comportamiento oscilante relacionado con la dinámica clásica está justificado.

n	σ (u.a.)	σ_{osc} (u.a.)	n	σ (u.a.)	σ_{osc} (u.a.)
2	3.080932	0.1044325	7	2.995667	-0.0458329
3	2.911871	-0.0776287	8	3.049801	-0.0046981
4	2.92202	-0.0804797	9	3.111884	0.0443840
5	3.062120	0.0466207	10	3.126153	0.0456539
6	3.037152	0.0086528	11	3.057247	-0.0362526

Cuadro 7.6: *Anchos del espectro de resolución finita para $t = 2$ u.a.*

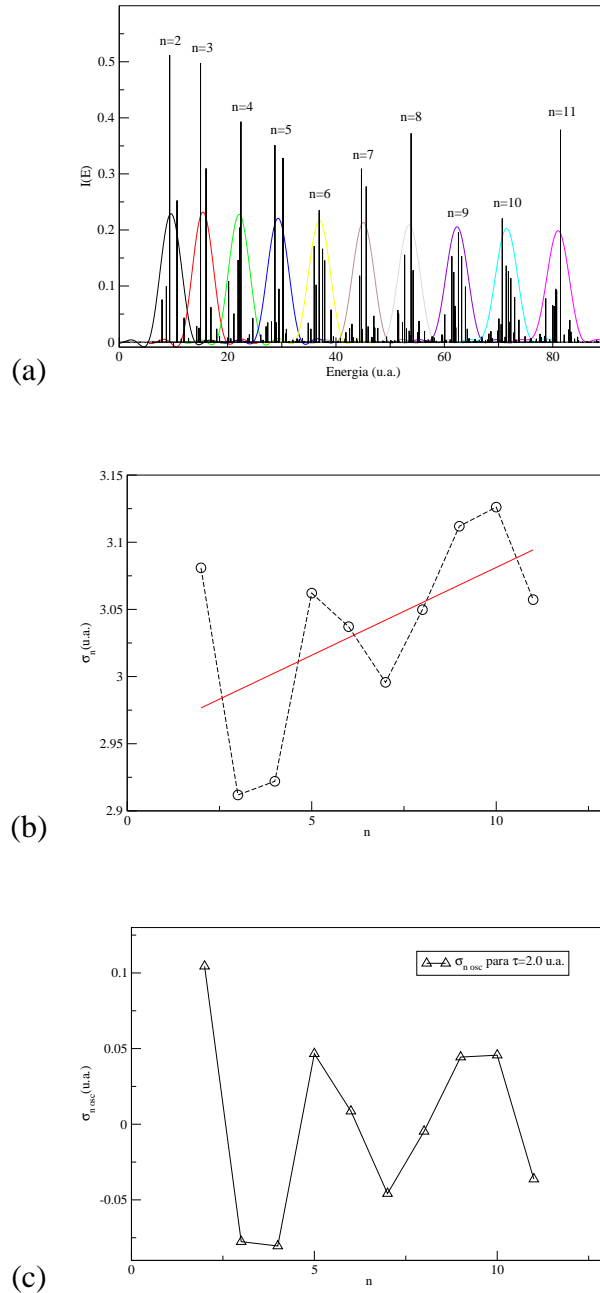


Figura 7.19: (a) Espectro suavizado para la función de scar sobre la órbita cuadrada para $\tau = 2,0$ u.a.; (b) Anchos de banda para el espectro de la figura (a); (c) Oscilaciones para los anchos de banda del espectro en (a) una vez eliminada el comportamiento regular. Comprobamos que el comportamiento cualitativo es prácticamente idéntico al de la figura (7.15-b) obtenida para $\tau = 1,3$ u.a.

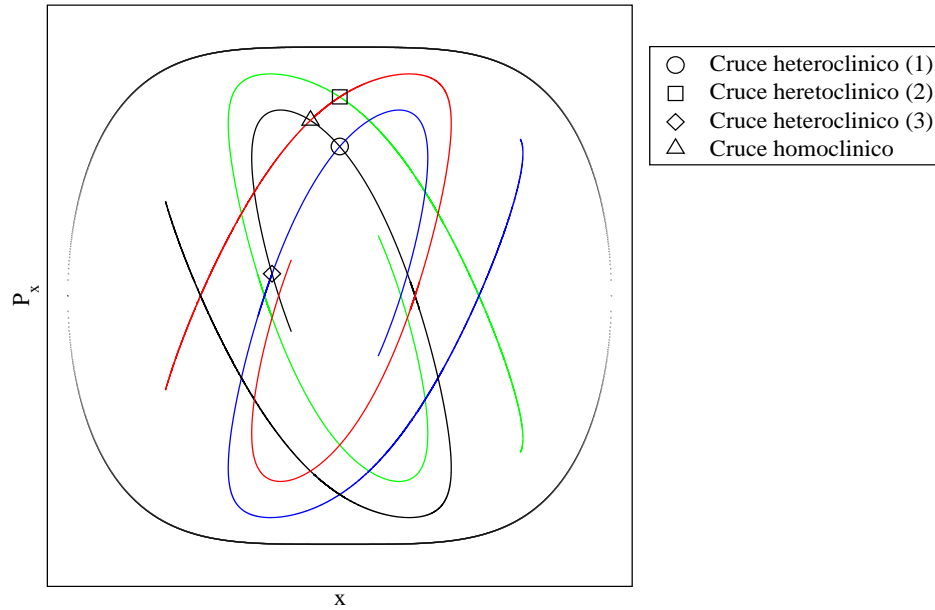


Figura 7.20: *Puntos homoclínicos y heteroclínicos relevantes de la estructura hiperbólica de la órbita cuadrada*

Influencia de órbitas periódicas relacionadas con la estructura hiperbólica en la construcción de scars

Como ya hemos puesto de manifiesto anteriormente, a la hora de construir scars, debemos tener en cuenta la densidad de probabilidad que se dispersa por el sistema hiperbólico y que tras un tiempo vuelve a través de las redes homo y heteroclínicas para solapar con la condición inicial. Los circuitos homo y heteroclínicos a través de los cuales ocurre este fenómeno, parecen estar controlados por ciertas órbitas periódicas relacionadas del sistema. En la figura (7.20) recogemos la superficie de sección $y = 0$ y la estructura hiperbólica generada a partir de los dos puntos fijos. Cada uno de los cortes homoclínicos y heteroclínicos que hemos estudiado hasta el momento y que daban lugar a las áreas que hemos analizado aparecen representados en ella. Tomamos como condición inicial para una trayectoria del sistema cada uno de estos puntos, y los dejamos evolucionar hasta que a través su correspondiente circuito homo o heteroclínico llegan a la cercanía del punto fijo de la órbita cuadrada.

Si representamos en el espacio de coordenadas las trayectorias obtenidas, el resultado es sorprendente: los circuitos por los cuales regresan a la proximidad del

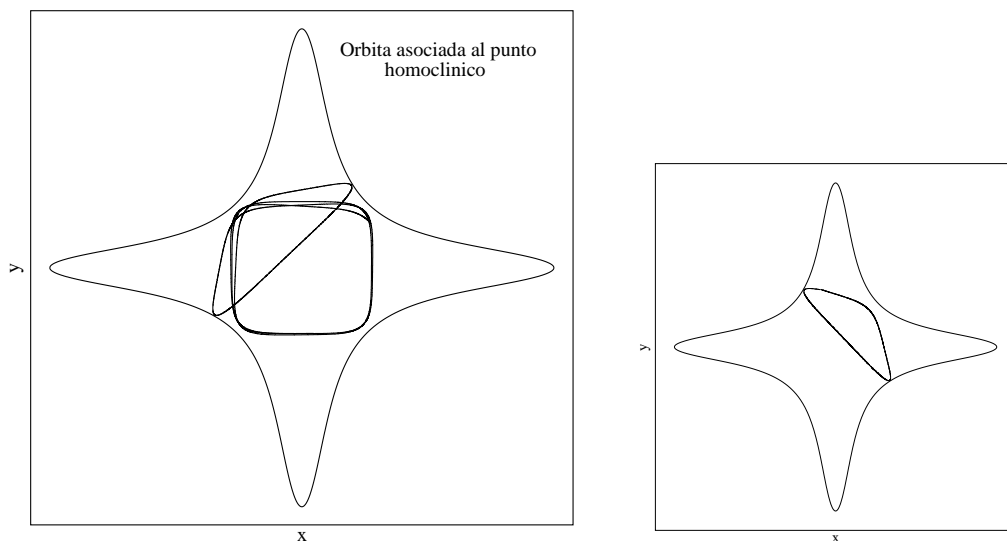


Figura 7.21: *Trayectoria en el espacio de configuraciones generada a partir del punto de corte homoclínico reflejado en la figura (7.20). A la izquierda se representa además la órbita periódica que conecta el circuito homoclínico con la órbita cuadrada.*

punto fijo son muy similares a ciertas órbitas periódicas del sistema que parecen estar muy relacionadas con la órbita cuadrada que es nuestro objeto de estudio. En las figuras (7.21) y (7.22) recogemos las trayectorias obtenidas a partir de puntos homo y heteroclínicos de la figura (7.20) hasta que a través de los circuitos hiperbólicos alcanzan el punto fijo. A su lado incluimos las órbitas periódicas clásicas relacionadas.

Así pues, parece obvio que la densidad de probabilidad que viaja por el sistema hiperbólico y que es responsable del fenómeno de scarring lo hace guiada por ciertas órbitas periódicas que se relacionan con la órbita original sobre la que se construye el scar. Sin embargo, aún desconocemos el porqué de este fenómeno, así como por qué son las órbitas que recogemos en las figuras (7.21) y (7.22) las responsables y no otras órbitas periódicas del sistema.

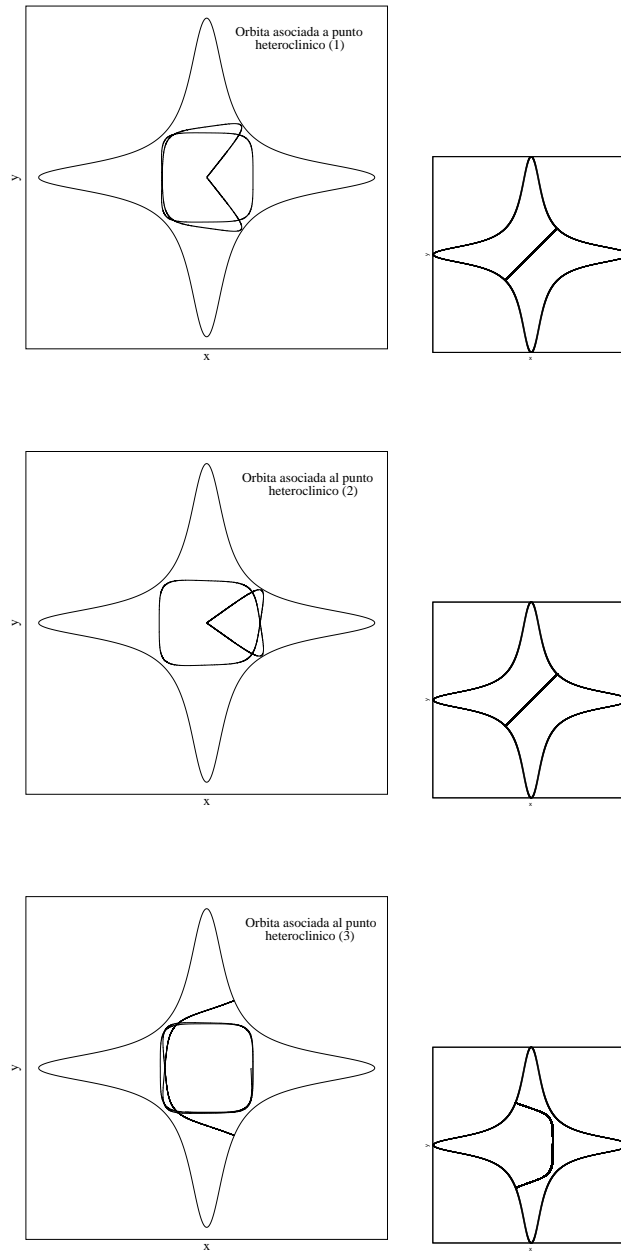


Figura 7.22: Trayectorias en el espacio de configuraciones generadas a partir de los puntos de corte heteroclínicos reflejados en la figura (7.20). A la izquierda se representan además las órbitas periódicas que conectan los distintos circuitos heteroclínicos con la órbita cuadrada.

7.3.3. Análisis de la distribución de Husimi en el espacio de fases

En esta sección vamos a interpretar el comportamiento en el espacio de fases de las funciones de scar obtenidas, haciendo uso para ello de la función de distribución de Husimi que hemos estudiado en la sección 6.4.2. Recordamos que la función de Husimi se puede representar como la densidad de probabilidad en la representación de estados coherentes, y al igual que operábamos en el caso clásico, en sistemas de dos grados de libertad, como el que nos ocupa, es posible definir la superficie de sección de Poincaré cuántica, de tal manera que el número de variables independientes de la función de Husimi se reduzca de cuatro a dos, y ésta pueda ser representada gráficamente (sección 6.4.2). En este caso, vamos a trabajar con la misma superficie de sección que en el caso clásico, fijando $y = 0$, con la ecuación (6.46). La función de Husimi de la ecuación (6.45) toma la forma

$$\begin{aligned} F^H(\bar{x}, \bar{p}_x, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} |\langle \beta_{\bar{x}, \bar{p}_x} | \Psi_E(t) \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \left| \int dx dy \beta_{\bar{x}, \bar{p}_x}(x, y) \Psi_E(x, y, t) \right|^2 \end{aligned} \quad (7.66)$$

donde $\beta_{\bar{x}, \bar{p}_x}$ ⁴ corresponde a un estado coherente o de mínima incertidumbre (ecuación 6.43) y $\Psi_E(\tau)$ a la función de scar que se ha dejado evolucionar hasta un tiempo t (ecuación 5.7), utilizando un suavizado sinusoidal. Para obtener las distribuciones de Husimi hemos desarrollado un programa que define una malla en la superficie de sección (\bar{x}, \bar{p}_x) , y que calcula la integral (7.66) haciendo uso de un integrador de Gauss-Hermite para las integrales en x y y . El análisis de las distribuciones de Husimi obtenidas para distintos tiempos t nos van a permitir estudiar la evolución de la densidad de probabilidad en la superficie de sección, y cómo esta evolución se produce a lo largo de la estructura hiperbólica clásica.

En la figura (7.23) estudiamos la evolución de la función de scar calculada para $n = 10$, para 6 tiempos comprendidos entre $t = 0,274$ u.a. y $t = 2,192$, comprobando como efectivamente la densidad de probabilidad se desplaza a lo largo de los circuitos homo y heteroclínicos. Además, en la figura (7.24) representamos la distribución de Husimi para un tiempo de $t = 1,37$ u.a. que se corresponde aproximadamente al tiempo de Ehrenfest, comprobando como efectivamente, para este valor, la densidad de probabilidad se concentra en los circuitos homo y heteroclínicos que hemos estudiado. Para el tiempo de $t = 2,192$ u.a, la densidad de probabilidad se dispersa por otros circuitos más complejos, complicándose el estudio de la mecánica clásica que hemos desarrollado.

⁴No confundir los estados coherentes $\beta_{\bar{x}, \bar{p}_x}$ con la constante β que da el grado de caoticidad del potencial cuártico en la ecuación (7.1)

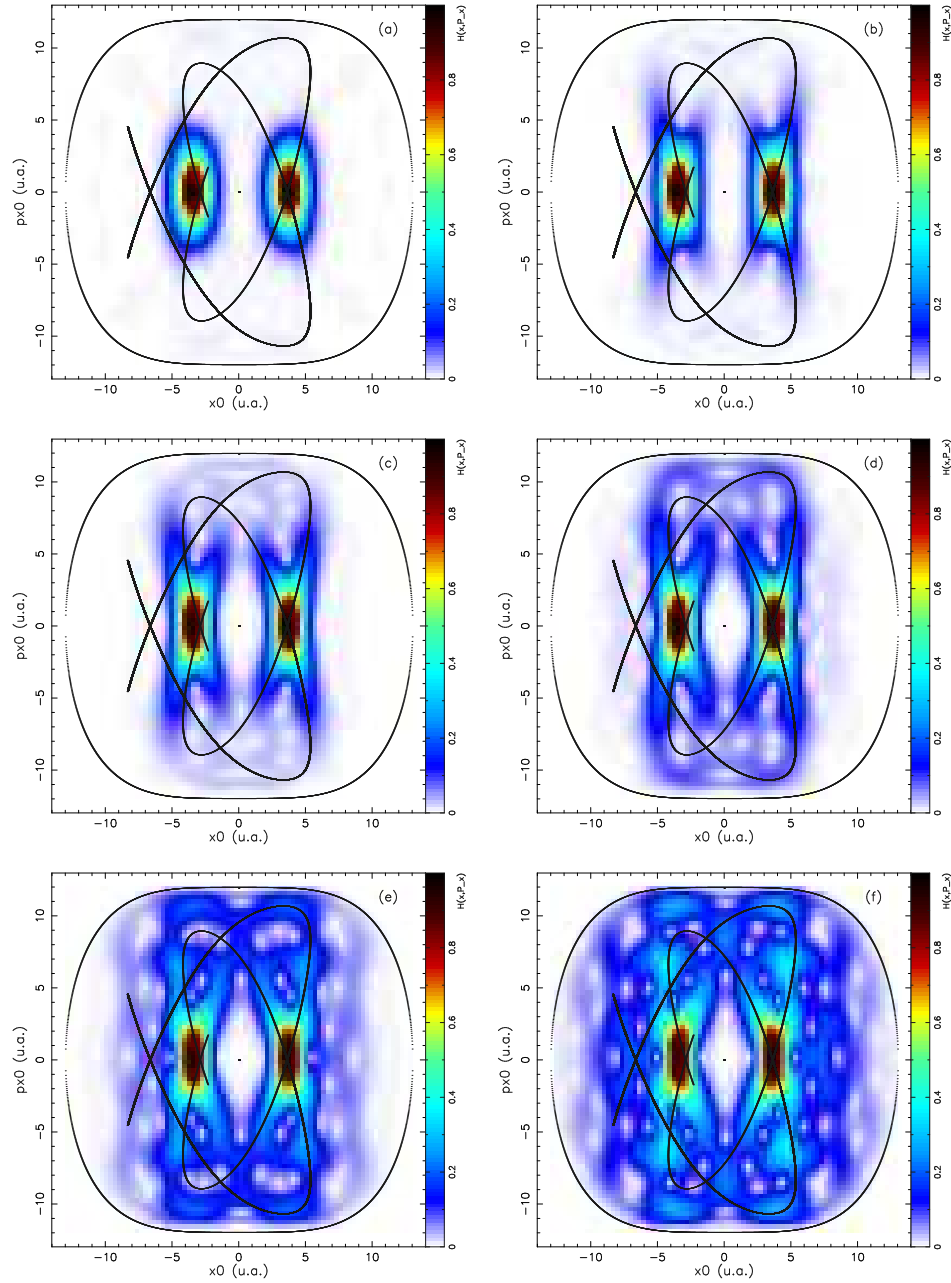


Figura 7.23: Distribuciones de Husimi en el espacio de fases de la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada con $n = 10$ evolucionada hasta diferentes tiempos. (a) $t = 0,274$ u.a., (b) $t = 0,548$ u.a., (c) $t = 0,822$ u.a., (d) $t = 1,096$ u.a., (e) $t = 1,644$ u.a., (f) $2,196$ u.a.

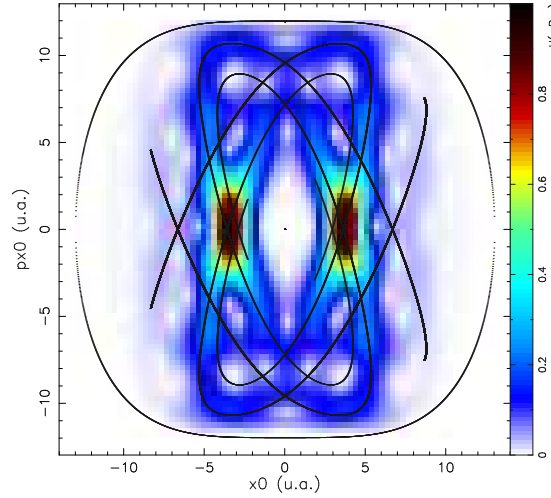


Figura 7.24: *Distribución de Husimi en el espacio de fases para la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada para $t = 1,37$ u.a., similar al tiempo de Ehrenfest del sistema*

7.4. Funciones de scar en el oscilador cuártico. Órbita lazo

En esta sección vamos a construir las funciones de scar $|\Psi_E(0)\rangle$ del sistema sobre la órbita periódica lazo, representada en la figura (7.1-f). El procedimiento para su construcción va a ser totalmente análogo al que hemos utilizado para la órbita cuadrada. Partimos de la órbita lazo para una energía de referencia de $E_0 = 1$ u.a. Las condiciones iniciales para esta órbita de referencia son las siguientes:

$$\begin{aligned} x_0 &= 2,0282017 \text{ u.a.} \\ y_0 &= 0 \text{ u.a.} \\ p_{x0} &= 0 \text{ u.a.} \\ p_{y0} &= 1,3839770 \text{ u.a.} \end{aligned} \quad (7.67)$$

Integrando las ecuaciones de Hamilton hasta un periodo obtenemos la órbita periódica lazo de referencia. Simultáneamente integrando la ecuación (7.14) obtenemos la variación de la acción clásica en el periodo, $S = 25,001880$ u.a. Las relaciones de escalado de las ecuaciones (7.10) nos permitirán obtener la órbita lazo a cualquier otro valor de la energía del sistema, así como de S .

Como antes, vamos a trabajar a las energías para las cuales la órbita periódica esta cuantizada de acuerdo con la condición EBK. Para la órbita lazo, al igual que en la órbita cuadrada, trabajamos en la simetría A_1 . Por tanto, determinamos la condición de cuantización para un cuarto del problema, y multiplicamos por cuatro para conseguir la condición EBK global. En este caso, $\mu = 3$ en un cuarto de la trayectoria, y la ecuación (7.40) se convierte en

$$S = 2\pi\hbar(4n + 3). \quad (7.68)$$

Utilizando (7.68) podemos conocer los valores de las acciones cuantizadas para la órbita, y aplicando las ecuaciones (7.10) y (7.13) sobre la órbita de referencia calculada para $E = 1$ u.a., obtenemos las energías de trabajo y las correspondientes órbitas periódicas para n comprendido entre $n = 2$ y $n = 26$. El periodo de la órbita lazo es mayor que el de la órbita cuadrada para un mismo n , y por tanto las energías correspondientes son más bajas. Esto nos permite trabajar con un mayor número de energías cuantizadas que en el caso de la órbita cuadrada, en el que el límite de $E = 90$ u.a. para el cual nuestros cálculos son fiables, nos restringía a valores de n menores que 12. En el cuadro (7.7) se encuentran recogidos los valores de la energía, variación de la acción clásica en un periodo, coeficiente de estabilidad y condiciones iniciales para las órbitas con n comprendido entre $n = 2$ y $n = 25$.

Una vez obtenidas las trayectorias, resolvemos la integral (7.36) para obtener nuestra función de scar a cada energía. En las figuras (7.25) y (7.26) recogemos las funciones de scar obtenidas para n comprendido entre 2 y 11, los mismos n con los que hemos trabajado en el caso de la órbita cuadrada. El resto de funciones de scar calculadas para la órbita lazo, con n comprendido entre 12 y 26, pueden consultarse en el apéndice E.

Como hemos comprobado, hemos sido capaces de construir las funciones de scar del sistema sobre una órbita periódica larga y complicada, como es el lazo. Este resultado mejora el método de Polavieja *et al* [10], en el cual al intentar construir el scar sobre la órbita lazo, la densidad de la función de onda se dispersaba por órbitas periódicas más cortas cercanas (como es la propia órbita cuadrada), impidiendo su obtención.

7.4.1. Espectroscopia de las funciones de scar para la órbita lazo.

El espectro de resolución infinita para las funciones de scar $|\Psi_E(0)\rangle$ construidas sobre la órbita lazo se obtiene de forma análoga a la descrita en la sección

n	E_{EBK} (u.a.)	$\Delta S(T)$ (u.a.)	λ (u.a.)	$x(0)$ (u.a.)
2	3.879715	22π	0.4991	2.846499
3	5.866755	30π	0.5980	3.156535
4	8.040463	38π	0.6470	3.415320
5	10.373215	46π	0.6895	3.639900
6	12.845804	54π	0.7274	3.839737
7	15.443955	62π	0.7617	4.020692
8	18.156564	70π	0.7931	4.186678
9	20.974699	78π	0.8223	4.340453
10	23.890993	86π	0.8495	4.484042
11	26.899244	94π	0.8750	4.618980
12	29.994145	102π	0.8992	4.746464
13	33.171098	110π	0.9221	4.867445
14	36.426067	118π	0.9439	4.982694
15	39.755480	126π	0.9648	5.092844
16	43.156147	134π	0.9848	5.299883
17	46.625202	142π	1.0040	5.299883
18	50.160049	150π	1.0225	5.397599
19	53.758324	158π	1.0404	5.491899
20	57.417867	166π	1.0577	5.583067
21	61.136692	174π	0.3911	5.671352
22	64.912966	182π	1.0906	5.756970
23	68.744993	190π	1.1064	5.840115
24	72.631195	198π	1.1217	5.920957
25	76.570102	206π	1.1366	5.999650
26	80.560342	214π	1.1511	6.076332

Cuadro 7.7: *Energía, acción clásica en un periodo, coeficiente de estabilidad λ y condiciones iniciales para la órbita cuadrada cuantizada mediante la condición EBK (7.68) con n comprendido entre 2 y 26. En el caso de la condición inicial sólo se proporciona $x(0)$, ya que en todos los casos $p_x(0) = 0$ u.a. y $y(0) = 0$ u.a., y $p_y(0)$ puede obtenerse a partir de los datos de $x(0), y(0), p_x(0)$ y E .*

7.3.1 para la órbita cuadrada. En el caso de la órbita lazo, nos hemos restringido al estudio de los espectros de resolución infinita de $n = 11$ y $n = 15$, porque en ellos la contribución a la función de scar es casi exclusiva de una única auto-función del oscilador cuártico, recuperando en gran medida el concepto de scar

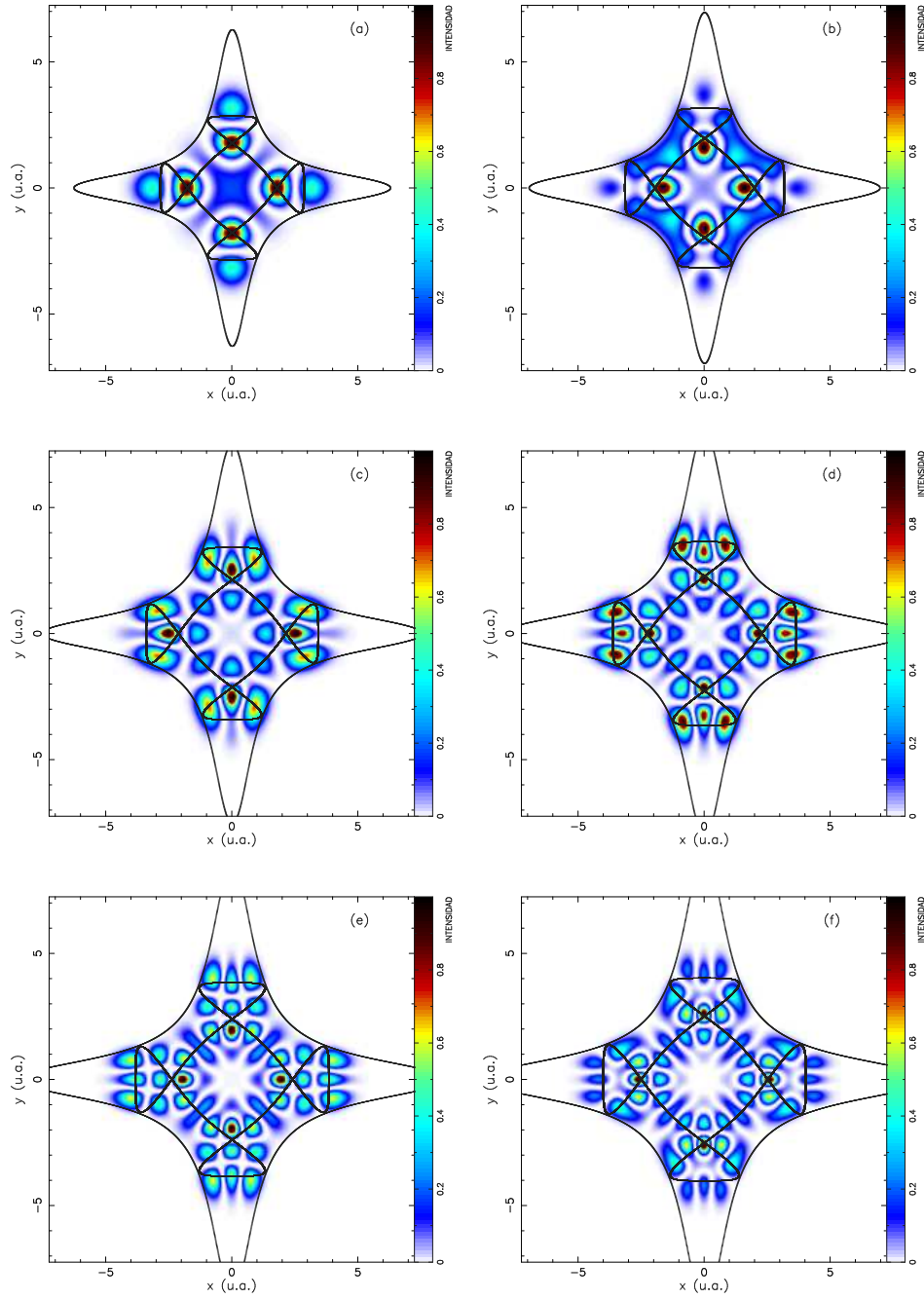


Figura 7.25: Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK en el espacio de configuraciones. (a) $n = 2$, (b) $n = 3$, (c) $n = 4$, (d) $n = 5$, (e) $n = 6$, (f) $n = 7$,

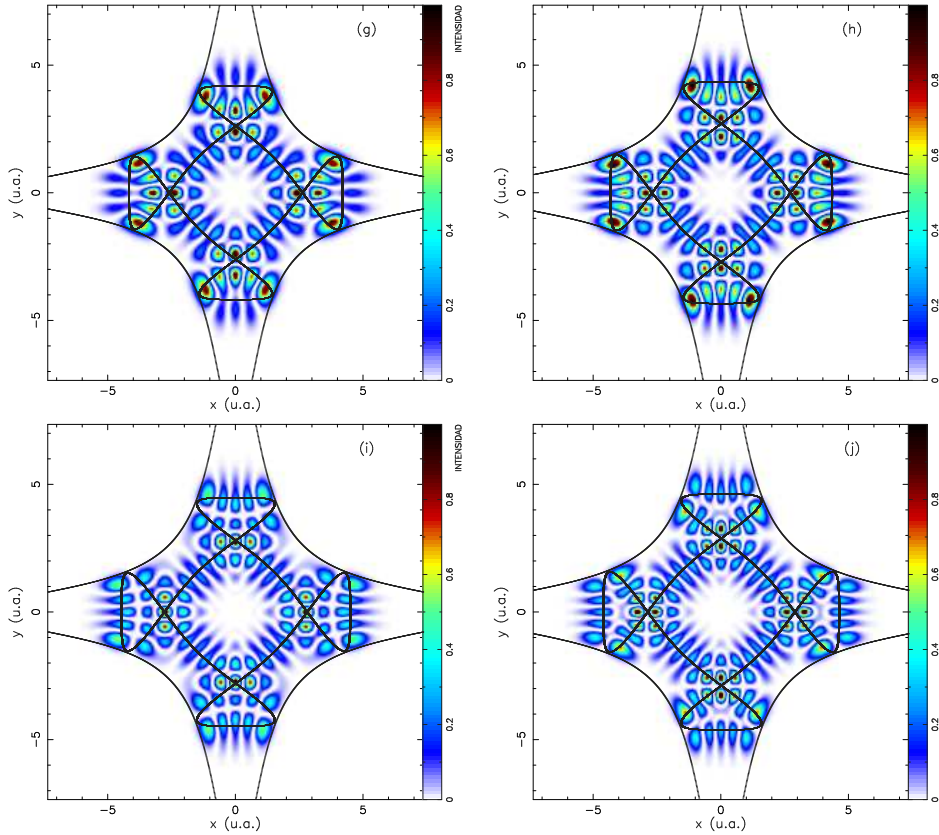


Figura 7.26: *Cont. fig. (7.25). Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK en el espacio de configuraciones. (g) $n = 8$, (h) $n = 9$, (i) $n = 10$, (j) $n = 11$*

introducido por Heller [7], en el que la densidad cuántica se encuentra localizada sobre autoestados individuales.

En la figura (7.27) se recoge el espectro para $n = 11$, centrado en $E_{EBK} = 26,8992$ u.a. en el que se observa como el estado 42, de $E = 26,5303$ u.a. del oscilador cuártico tiene una contribución mayor del 80 por ciento en la función de scar. Lo mismo ocurre con el espectro para $n = 15$ centrado en $E_{EBK} = 39,7555$ u.a., que tiene una contribución casi única del autoestado 73 del oscilador cuártico, de $E = 39,5322$ u.a., como podemos observar en la figura (7.28). Esto contrasta con los espectros obtenidos para la órbita lazo, que no mostraban una participación fundamental de autoestados individuales en las funciones de scar.

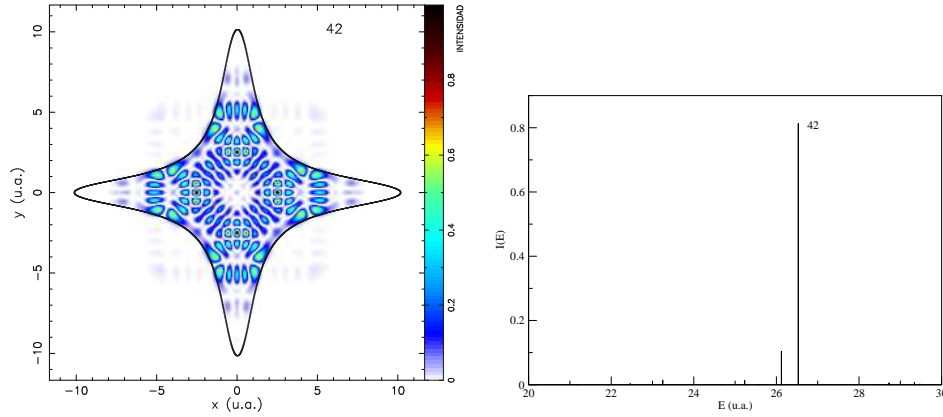


Figura 7.27: Autoestado 42 del oscilador cuártico y espectro de la función de scar de la órbita lazo para $n = 11$. El autoestado 42 contribuye de forma casi exclusiva al espectro y por tanto a la función de scar.

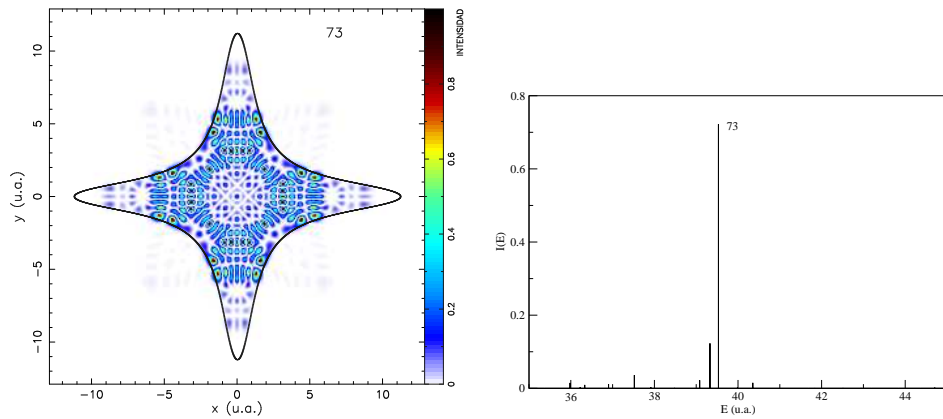


Figura 7.28: Autoestado 73 del oscilador cuártico y espectro de la función de scar de la órbita lazo para $n = 15$. El autoestado 73 contribuye de forma casi exclusiva al espectro y por tanto a la función de scar.

7.4.2. Análisis de la distribución de Husimi en el espacio de fases

Al igual que en el caso de la órbita cuadrada vamos a estudiar el comportamiento de las funciones de scar obtenidas en el espacio de fases haciendo uso para ello de la función de distribución de Husimi (ecuación 7.66) en la superficie de sección cuántica definida por $y = 0$. Utilizando el programa en Fortran 77 desa-

rollado para resolver la ecuación (7.66) estudiaremos la evolución de la densidad de probabilidad en la superficie de sección para $n = 13$ y 6 tiempos distintos comprendidos entre $t = 0,195$ u.a. y $t = 1,953$ u.a., recogidos en la figura (7.29).

Comprobamos que el análisis la distribución de Husimi de las funciones de scar en la superficie $y = 0$ resulta mucho más complicado que en el caso de la órbita cuadrada. Esto es lógico si pensamos que para esta última (figura 7.1-e) sólo encontramos dos puntos fijos, para los cuales, además $p_x = 0$, lo que hace que inicialmente la densidad de la función de Husimi se concentre en torno a los dos puntos fijos de coordenadas $(x, P_x) = (x, 0)$ en el espacio de fases. Sin embargo, para la órbita lazo (figura 7.1-f) en la superficie de sección $y = 0$ tendremos cuatro puntos fijos, dos de los cuales con $p_x = 0$, y otros dos con $p_x \neq 0$ ($p_x = \pm$ en el caso de $n = 13$) que coinciden con las curvas que dan lugar a los bucles del lazo en la figura (7.1-f). Esta estructura en bucle hace además, que la densidad de F^H tienda a concentrarse inicialmente en ellos de forma prioritaria (aunque no exclusiva, debido a la existencia de los otros dos puntos fijos en $(\pm x, 0)$), como se observa en las regiones fuertemente coloreadas de rojo de las figuras (7.29-a), (7.29-b), (7.29-c), y (7.29-d).

En esta ocasión, problemas de tiempo nos han impedido la obtención de la estructura clásica hiperbólica para completar un análisis mas exhaustivo de la complejidad que presentan las distribuciones de Husimi obtenidas.

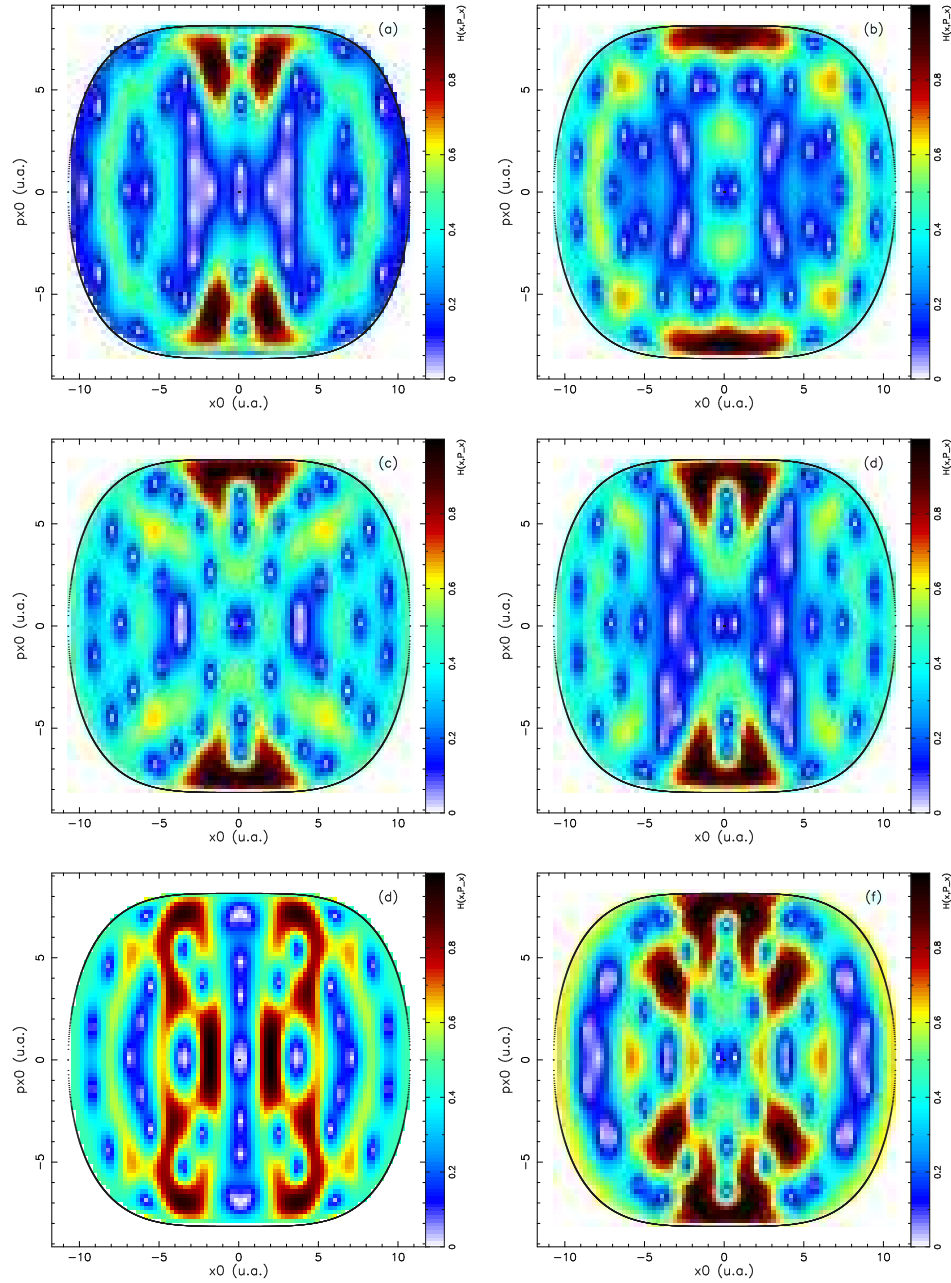


Figura 7.29: Distribuciones de Husimi en el espacio de fases de la función de scar centrada sobre la órbita cuadrada con $n = 10$ evolucionada hasta diferentes tiempos. (a) $t = 0,195$ u.a., (b) $t = 0,391$ u.a., (c) $t = 0,782$ u.a., (d) $t = 1,172$ u.a., (e) $t = 1,563$ u.a., (f) $1,953$ u.a.

Capítulo 8

Funciones de scar en el sistema molecular LiCN-LiNC

8.1. Introducción

En este capítulo vamos a proceder a construir funciones de scar con el método que hemos desarrollado en sistemas moleculares. El modelo que se va a estudiar es la dinámica de las vibraciones moleculares del LiCN-LiNC. El sistema es representativo de una gran variedad de moléculas triatómicas, que exhiben un comportamiento similar, principalmente derivado de una gran amplitud de movimiento en uno de los modos vibracionales. Este grupo incluye otros cianuros, como los sistemas HCN/HNC, RbCN/RbNC o el KCN, así como otras especies similares, como el HCP o ciertos complejos de van der Waals. Sin embargo, estas moléculas presentan diferencias significativas en sus potenciales de interacción: Mientras que tanto LiCN/LiNC como RbCN/RbNC y HCN/HNC son sistemas de isomerización, que presentan dos isómeros estables para sus configuraciones lineales X-CN y X-NC ($X=\text{Li}, \text{Rb}, \text{H}$), en el caso del HCP la estructura lineal es inestable, y para el KCN la configuración más estable es angular.

En el caso de la molécula de LiCN el átomo de Li puede rotar fácilmente en torno al CN, explorando una buena parte de la superficie de energía potencial, en la que existen importantes anarmonicidades y acoplamientos entre modos de vibración. Esto provoca la aparición de caos para valores bajos de la energía de excitación vibracional. Otra característica importante del sistema es el hecho de que la frecuencia vibracional del enlace triple C-N sea muy elevada, y por tanto se pueda separar del resto de modos de vibración del sistema. Por último, la barrera energética que separa los dos isómeros estables LiCN-LiNC es bastante reducida. Todas estas características hacen del LiCN/LiNC un sistema dinámico

muy interesante: constituye un ejemplo genérico en física molecular que puede ser descrito de forma muy realista y que se ha usado frecuentemente en el pasado, especialmente en el marco del estudio de las manifestaciones cuánticas del caos clásico y cuántico [68].

En este caso nos vamos a limitar a construir las funciones de scar sobre alguna órbita inestable del sistema y no vamos a llevar a cabo un análisis espectroscópico de las funciones obtenidas ni a estudiar el comportamiento de la distribución de Husimi en el espacio de fases. Simplemente pretendemos ilustrar como nuestro método de construcción de funciones de scar sobre órbitas periódicas inestables es aplicable a cualquier tipo de sistemas que exhiban un comportamiento clásico parcial o totalmente caótico, incluidos sistemas moleculares.

8.2. Estudio cuántico del sistema molecular LiCN-LiNC

El interés del estudio del sistema LiCN-LiNC se centra en la vibración, es decir, en los movimientos relativos entre núcleos. Desafortunadamente, si bien es posible separar el movimiento traslacional del sistema para el estudio de la vibración, no ocurre lo mismo con el rotacional, que se encuentra íntimamente ligado al vibracional. Sí es posible, sin embargo, obtener un hamiltoniano que dependa únicamente de coordenadas internas, pero sólo para estados no excitados rotacionalmente. La obtención del hamiltoniano vibracional para moléculas triatómicas fue efectuada por Tennyson y Sutcliffe [69]. Aquí vamos a aplicar sus resultados al caso del LiCN-LiNC.

El número de grados de libertad del movimiento nuclear del LiCN es nueve, tres por cada núcleo. Esto implica que el operador hamiltoniano asociado dependerá de nueve operadores de posición $H(x_1, \dots, x_9)$. Este Hamiltoniano se puede separar en dos términos mediante una transformación adecuada de coordenadas

$$H(x_1, \dots, x_9) = H_t(X_1, X_2, X_3) + H_{vr}(v_1, \dots, v_6) \quad (8.1)$$

donde $H_t(X_1, X_2, X_3)$ corresponde al Hamiltoniano traslacional del centro de masas del sistema (3 grados de libertad) y $H_{vr}(v_1, \dots, v_6)$ al Hamiltoniano vibrorrotacional (6 grados de libertad).

En este punto se requiere una nueva transformación de coordenadas para llevar a cabo una pseudoseparación del hamiltoniano vibrorrotacional. Ésta consiste en tomar como coordenadas internas las llamadas coordenadas de Jacobi (R, r, θ),

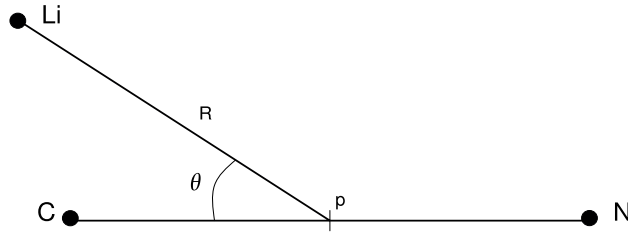


Figura 8.1: *Coordenadas internas para el LiCN. El punto p corresponde al centro de masas carbono-nitrógeno*

donde R es la distancia entre el Li y el centro de masas del CN , r es la distancia $C - N$ y θ es el ángulo formado por r y R . Así, $\theta = 0$ para la configuración lineal $Li - C - N$ y π para $Li - N - C$ (ver figura 8.1). Como coordenadas de rotación se toman los ángulos de Euler (ϕ, χ, ζ) . Así, el hamiltoniano vibrorrotacional toma la siguiente forma:

$$H_{vr}(R, r, \theta, \phi, \chi, \zeta) = H_v(R, r, \theta) + H'_{vr}(R, r, \theta, \phi, \chi, \zeta) \quad (8.2)$$

cumpléndose que $H'_{vr}(R, r, \theta, \phi, \chi, \zeta) = 0$ para el estado rotacional fundamental. Por tanto, para estados no excitados rotacionalmente, que va a ser nuestro caso, el hamiltoniano vibracional de Tennyson y Sutcliffe resulta ser

$$\begin{aligned} H_{vr}(R, r, \theta, \phi, \chi, \zeta) &= H_v(R, r, \theta) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1 R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r^2} \right] \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + V(R, r, \theta) \end{aligned} \quad (8.3)$$

donde

$$\mu_1 = \frac{m_{Li}(m_C + m_N)}{m_{Li} + m_C + m_N}, \quad \mu_2 = \frac{m_C m_N}{m_C + m_N} \quad (8.4)$$

Con el objeto de reducir la dimensionalidad del problema de tres a dos grados de libertad, se impondrá una restricción adicional que consiste en fijar la distancia r a su valor de equilibrio $r = r_0$. El valor tomado corresponde al límite Hartree-Fock para el anión CN^- , $r_0 = 2,186$ u.a. Esta restricción supone una aproximación aceptable, ya que el enlace C-N es en este caso, un enlace covalente triple. Este enlace es muy fuerte, mientras que el Li interaccionaría con el grupo CN a través de una interacción iónica mucho más débil. Así la expresión (8.3) resulta

$$\begin{aligned} H_v(R, \theta) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_1 R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r_0^2} \right] \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + V(R, \theta) \end{aligned} \quad (8.5)$$

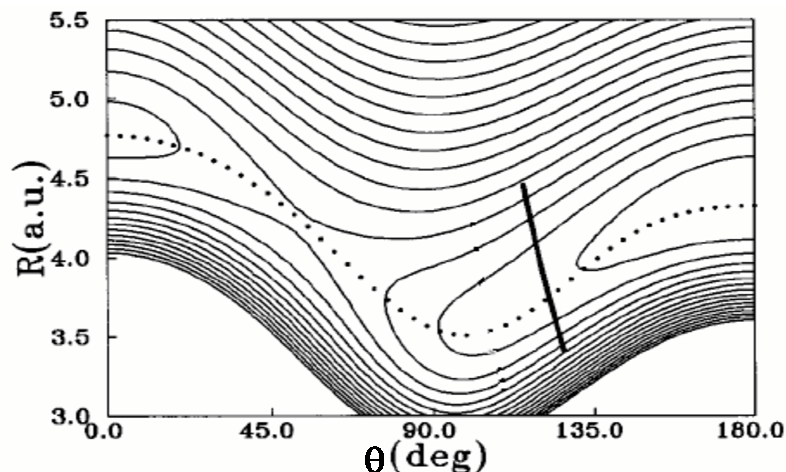


Figura 8.2: Contornos energéticos para la superficie de energía potencial del sistema LiCN-LiNC. $\theta = 0$ corresponde al mínimo del LiCN y $\theta = 180^\circ$ al mínimo para el LiNC. El camino de mínima energía $R_e(\theta)$ que conecta los dos isómeros está representado como un línea de puntos. Superpuesta aparece la órbita periódica inestable relevante en la construcción de nuestra función de scar para $E = 0,0183464$ u.a.

8.3. Superficie de Energía Potencial SEP

La superficie de energía potencial $V(R, \theta)$ que va a utilizarse es la calculada por Essers *et al* [70]. Esta SEP consiste en una expansión a nueve términos del potencial en polinomios de Legendre, de modo que

$$V(R, \theta) = \sum_{\lambda=0}^9 P_{\lambda}(\cos \theta) v_{\lambda}(R) \quad (8.6)$$

donde los coeficientes v_{λ} que contienen contribuciones de corto y largo alcance se han obtenido por ajuste a los datos numéricos obtenidos por Wormer [71] utilizando datos mecanocuánticoa "ab initio". Estos se realizaron dentro de la aproximación SCF (*Self Consistent Field*) usando una base de orbitales gaussianos ($11s, 6p, 2d, 2d/6s, 3p, 2d$). En la figura (8.2) se presenta una representación de contornos de la SEP. Los dos isómeros LiNC y LiCN, que aparecen a $\theta = 180^\circ$ respectivamente, son fácilmente visibles como pozos de potencial. El camino de mínima energía que conecta los dos pozos puede ajustarse a la expresión

$$R_e(\theta) = 4,1159 + 0,25510 \cos \theta + 0,49830 \cos 2\theta - 0,053427 \cos 3\theta \\ - 0,068124 \cos 4\theta + 0,020578 \cos 5\theta \quad (8.7)$$

y está representado con una línea discontinua en la figura (8.2).

Existen en la literatura cálculos más precisos de la superficie de potencial del sistema LiCN/LiNC. Makarewitz y Ha [72, 73] llevaron a cabo cálculos *ab initio* incluyendo correlación electrónica a nivel MP2 y MP4. Las geometrías que obtienen para los mínimos están en un buen acuerdo con las predichas por Esser *et al*, pero existen diferencias significativas en sus energías relativas. Otra diferencia es la existencia de un mínimo estable en la región en torno a $(R, \theta) = (3,65u.a., 110^\circ)$ en la superficie de Makarewitz y Ha, donde Esser *et al* sólo encuentran una pequeña meseta. Sin embargo, esta circunstancia no es muy significativa desde un punto de vista dinámico, ya que en esta región existe un mecanismo de separación adiabática para altos valores de excitación de la coordenada R , que da lugar a un mínimo. Además, no existe evidencia experimental de la existencia de este mínimo.

El interés de la superficie de Esser *et al* radica en la gran diferencia en las frecuencias y en su comportamiento respecto a la armonicidad entre los dos grados de libertad (R relativamente armónica respecto a la anarmonicidad de θ). Además la existencia de dos mínimos conectados por dos puntos de silla, y en general, la carencia de simetrías especiales hacen que se trate de un potencial genérico que nos permite extrapolar las conclusiones a sistemas semejantes.

8.4. Estudio clásico del sistema molecular LiCN-LiNC

La función hamiltoniana clásica para la vibración de una molécula de LiCN no rotante es

$$H_{vr}(R, r, \theta, P_R, P_r, P_\theta) = \frac{P_R^2}{2\mu_1} + \frac{P_r^2}{2\mu_2} + \left[\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r^2} \right] \frac{P_\theta^2}{2} + V(R, r, \theta) \quad (8.8)$$

con

$$\mu_1 = \frac{m_{Li}(m_C + m_N)}{m_{Li} + m_C + m_N}, \quad \mu_2 = \frac{m_C m_N}{m_C + m_N} \quad (8.9)$$

Si aplicamos la restricción $r_{CN} = r_0$ la función resultante queda

$$H_{vr}(R, \theta, P_R, P_\theta) = \frac{P_R^2}{2\mu_1} + \left[\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r_0^2} \right] \frac{P_\theta^2}{2} + V(R, \theta) \quad (8.10)$$

8.5. Scars en el sistema molecular LiCN-LiNC

A continuación vamos a construir funciones de scar sobre una única órbita periódica del sistema molecular LiCN-LiNC. Con ello conseguiremos ejemplificar la obtención de estas funciones en sistemas moleculares. La construcción de nuevas funciones sobre otras órbitas periódicas inestables del sistema se llevará a cabo de forma idéntica a la que vamos a ilustrar a continuación. La órbita periódica sobre la que vamos a trabajar se representa en la figura (8.2). Al igual que para el sistema cuártico empleamos la aproximación FGA y la ecuación (7.36) que nos daba la función de scar en el sistema cuártico toma en esta ocasión la forma

$$\Psi(R, \theta) \approx N \int_0^T dt e^{i\left(\frac{S}{\hbar} - \frac{\mu t}{2T}\right) - \alpha_R(R-R_t)^2 - \alpha_\theta(\theta-\theta_t)^2 + \frac{i}{\hbar} p_{Rt}(R-R_t) + \frac{i}{\hbar} p_{\theta t}(\theta-\theta_t)} \quad (8.11)$$

Donde N es un factor de normalización al igual que para el sistema cuártico, hemos empleado la aproximación FGA, y N es un factor de normalización. Los valores de α_θ y α_R están tomados de la bibliografía [42]:

$$\begin{aligned} \alpha_R &= 16,114 \quad u.a. \\ \alpha_\theta &= 14,123 \quad u.a. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Para la órbita de trabajo, encontramos dos puntos de retorno tras completar un periodo y por tanto el valor del índice de Maslov, μ es igual a 2. La condición de cuantización EBK para la órbita queda en este caso como

$$S = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4}\right) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (8.13)$$

Obtener las energías cuantizadas a las que vamos a trabajar es ahora más complicado que en el sistema cuártico, ya que ahora la dinámica en el sistema LiCN-LiNC no es escalable. Para conseguir los valores de la energía cuantizada recurrimos a los datos de [74] para el espectro del sistema LiCN-LiNC. Las bandas $n = 4$ y $n = 6$ se encuentran comprendidas entre las energías 0,01585304 u.a. y 0,0212545 u.a. Tomando estos dos datos como extremos, construimos una malla de energías y localizamos la condición inicial de la órbita periódica para cada una de ellas. Empleando el integrador de Gear [75] iniciado por un Runge-Kutta, se resuelven las ecuaciones de Hamilton para el sistema, así como una ecuación que permite obtener la variación de la acción clásica para un periodo de la órbita. Con las variaciones de S obtenidas, calculamos con la ecuación (8.13) el correspondiente n . Un ajuste lineal de las energías de la malla en función de los valores de n calculados nos lleva a la expresión

$$E(n) = 0,00647 + 0,002968n, \quad (8.14)$$

con un valor del coeficiente de regresión de

$$r^2 = 0,999998 \quad (8.15)$$

La ecuación (8.14) nos permite intrapolar las energías cuantizadas para $n = 4$,

n	E_{EBK} (u.a.)	Ψ_0 (grados)	P_{Ψ_0} (u.a.)
4	0.0183464	121.411	-2.83963
5	0.0213148	125.409	-4.15099
6	0.0242832	128.478	-4.96625

Cuadro 8.1: *Energía, acción clásica en un periodo, y condiciones iniciales para la órbita de la figura (8.2) cuantizada mediante la condición EBK (7.40) con n comprendido entre 4 y 6.*

$n = 5$ y $n = 6$. En el cuadro (8.1) recogemos las energías correspondientes a cada n , así como la condición inicial a partir de la cual calculamos la órbita periódica para cada una de ellas.

Obtenemos ahora las órbitas periódicas para cada una de las tres energías, y con ellas, aplicando la ecuación (8.11) construimos las funciones de scar correspondientes, que se recogen en la figura (8.3). Comprobamos que se encuentran perfectamente localizadas sobre la órbita periódica y contando el número de nodos nos aseguramos de que la cuantización efectuada es correcta.

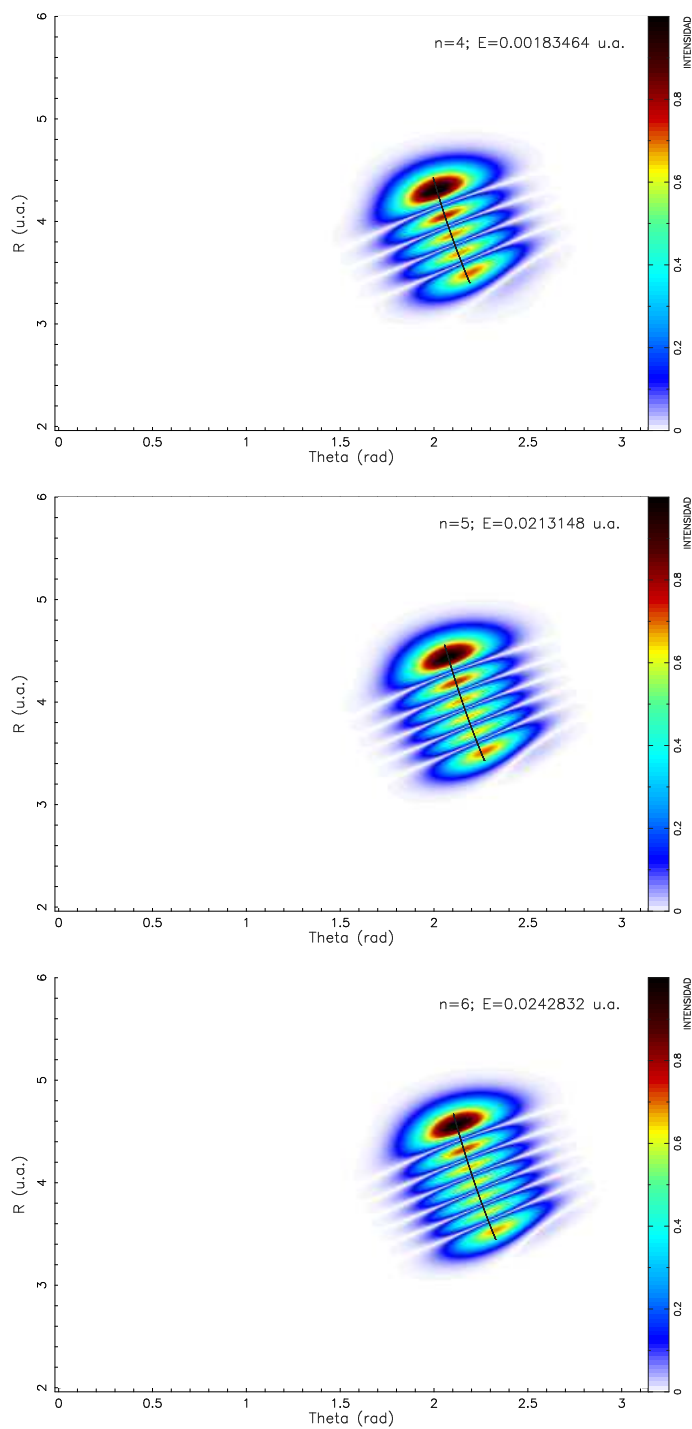


Figura 8.3: Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita periódica inestable de la figura (8.2) cuantizadas para $n = 4$, $n = 5$ y $n = 6$

Capítulo 9

Conclusiones

En esta tesis hemos desarrollado un nuevo método para la construcción de funciones de scar aplicable tanto a sistemas mixtos como a sistemas totalmente caóticos. A continuación vamos a enumerar las principales conclusiones obtenidas.

1. El método desarrollado para construir funciones de scar sobre órbitas periódicas inestables del sistema considerado se basa en llevar a cabo una transformada de Fourier sobre un paquete de ondas forzado a mantenerse centrado en dichas órbitas periódicas. Las energías a las cuales se realiza la transformada son aquellas para las cuales la órbita periódica en cuestión está cuantizada según la condición de cuantización semiclásica EBK. Para estas energías el scarring es óptimo. El incremento secuencial de una unidad en la condición EBK nos permite ir obteniendo las sucesivas excitaciones de la función de scar sobre la órbita considerada.
2. La expresión del paquete de ondas centrado en la órbita periódica considerada se obtiene a partir del propagador semiclásico desarrollado por Littlejohn, válido para cualquier forma funcional del paquete. En nuestro trabajo, lo hemos utilizado para paquetes de onda gaussianos. La aplicación del propagador de Littlejohn [9] a paquetes gaussianos nos lleva a una ecuación, ya utilizada por Heller en otro contexto [50], que nos permite obtener la expresión de la función de onda a tiempo t . Para facilitar los cálculos llevamos a cabo dos aproximaciones: obligamos al paquete de ondas a moverse rígidamente centrado en la órbita periódica sin deformarse (*Frozen Gaussian Approximation*) y además consideramos que el término que contiene la información de fase en nuestra expresión evoluciona de forma lineal dentro del periodo de la órbita para el índice de Maslov. Aproximaciones análogas han dado buenos resultados a la hora de generar espectros y describir procesos de fotodisociación, scattering Raman o espectros de estados altamente

excitados y simplifican los cálculos en gran medida.

3. Hemos aplicado nuestro método a la construcción de funciones de scar sobre la órbita periódica cuadrada del oscilador cuártico, un sistema casi totalmente caótico. Los resultados obtenidos pueden compararse con los obtenidos por Polavieja, Benito y Borondo a partir de un método diferente de construcción. La concordancia entre las funciones de scar obtenidas por ambos métodos, así como para los datos espectrales, es excelente.
4. A partir del estudio del espectro de resolución infinita para las funciones de scar obtenidas comprobamos que la densidad cuántica de los scars no se localiza sobre un único autoestado individual del sistema, como ocurría en el caso del billar de Bunimovich estudiado por Heller, sino sobre una combinación lineal de autofunciones del sistema, cuyos coeficientes pueden determinarse a partir de la intensidad de las bandas del espectro.
5. A partir del estudio de los anchos del espectro suavizado de nuestras funciones para tiempos cercanos al tiempo de Ehrenfest, podemos establecer relaciones entre la dinámica clásica del sistema y su comportamiento cuántico. En particular, hemos estudiado la influencia de la dinámica hiperbólica linearizada en la proximidad de la órbita periódica. La dinámica hiperbólica está relacionada con la construcción de scars ya que parte de la densidad de probabilidad se dispersa por las variedades inestables y vuelve a la órbita periódica a través de los circuitos homo y heteroclínicos dando lugar a recurrencias responsables del fenómeno de scarring. En particular, hemos comprobado cómo las áreas definidas por los circuitos homo y heteroclínicos inducen fluctuaciones en los anchos de las distintas bandas espectrales del espectro suavizado. Este estudio es no obstante mejorable, ya que las limitaciones de nuestro esquema de integración nos obliga a restringirnos al estudio de 10 bandas del espectro.
6. Proponemos que la densidad de probabilidad al recorrer las redes homo y heteroclínicas para dar lugar a las recurrencias sobre la órbita periódica cuadrada que originan las funciones de scar no lo hace guiada por trayectorias aleatorias, sino a través de ciertas órbitas periódicas del sistema relacionadas con la órbita objeto de estudio. Futuros estudios deberían analizar por qué se produce este fenómeno, así como por qué son una órbitas periódicas y no otras las que gobiernan los circuitos homo y heteroclínicos.
7. Estudiamos las distribuciones de Husimi en el espacio de fases para nuestras funciones de scar, comprobando cómo la densidad de la función de onda se desplaza a lo largo de la estructura hiperbólica, cubriendo a tiempos cercanos al tiempo de Ehrenfest los principales circuitos homo y heteroclínicos.

8. Tras estudiar la órbita cuadrada del oscilador cuártico, hemos pasado a estudiar la órbita lazo de este mismo sistema. El método desarrollado por Polavieja *et al* no era capaz de construir funciones de scar con órbitas tan largas y con cruces. En contraposición, con el método desarrollado en este trabajo, podemos generar las correspondientes funciones de scar sin dificultad añadida.
9. Por último, hemos extendido nuestro método de construcción de funciones de scar a un sistema mixto molecular, el LiCN-LiNC, demostrando que se puede aplicar para obtener scars sobre órbitas periódicas inestables de cualquier sistema que presente clásicamente un comportamiento parcial o totalmente caótico

Apéndice A

Índices de Maslov

A.1. Teoría WKB

La aproximación WKB (Wentzel-Keller-Brillouin) [3, 4] es una teoría semi-clásica que permite obtener funciones de onda y sus autovalores en sistemas ligados. Según esta teoría, una función de onda independiente del tiempo puede expresarse como una suma finita de términos de la forma

$$\psi \approx \sum_{r=1}^R B_r e^{iS_r/\hbar} \quad (\text{A-1})$$

donde $S_r = S(p_r, q_r)$ es la función de acción clásica, y B_r es un factor preexponencial que varía lentamente en comparación con S_r . De esta forma en cualquier punto accesible en el espacio de configuraciones puede construirse una función de onda estacionaria por superposición de hasta R ondas construidas sobre R trayectorias cerradas en el espacio.

Las condiciones límites de la función de acción en la aproximación WKB dan lugar a la llamada condición de cuantización EBK (Einstein-Brillouin-Keller) [2, 3, 4]

$$\oint_{C_j} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu_j}{4} \right). \quad (\text{A-2})$$

donde se tiene en cuenta que el espacio de fases en sistemas integrales se organiza en toros invariantes, y $\{C_1, \dots, C_f\}$ es la base de ciclos linealmente independientes en el toro. μ_j es un número entero que depende únicamente de la forma de la acción; no es ningún número cuántico y recibe el nombre de *índice de Maslov*. La condición de cuantización EBK sólo es válida para sistemas integrables. En sistemas no integrables, es necesario recurrir a la función de traza de Gutzwiller (ver sección 3.2.1) para llevar a cabo la cuantización.

A.2. Función del índice de Maslov. Índice de Maslov

Sea $z = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ un punto de una trayectoria en el espacio de fases y $S_{\mathbf{q}}(z)$ la correspondiente función de acción en el espacio de configuraciones (y $S_{\mathbf{p}}(z)$ en el espacio de momentos). A la hora de construir funciones de onda con la teoría WKB (ecuación A-1) en la representación de coordenadas, surgen problemas cuando aparece una singularidad en la función $S_{\mathbf{q}}(z)$. Para evitar este problema, se lleva a cabo una transformada de Fourier para trabajar en la representación de momentos, donde la singularidad desaparece. Cuando surja una singularidad en $S_{\mathbf{p}}(z)$, repetiremos la estrategia anterior, volviendo a la representación de coordenadas. La *función índice* es un contador de las singularidades en las funciones de acción $S_{\mathbf{q}}(z)$ y $S_{\mathbf{p}}(z)$. Para ello tiene en cuenta que en la representación de coordenadas la derivada $d\mathbf{p}/d\mathbf{q}$ cambia de signo pasando por infinito al atravesar una singularidad, instante en el que se pasa a trabajar en la representación de momentos. Los puntos en los que $d\mathbf{p}/d\mathbf{q}$ es singular (o $d\mathbf{q}/d\mathbf{p}$) reciben el nombre de *puntos de retorno*, y en ellos la función de onda presenta discontinuidades denominadas *cáusticas* debidas a las discontinuidades en la función de acción.

Cuando en la representación de momentos se llega a una singularidad, la derivada $d\mathbf{p}/d\mathbf{q}$ vuelve a cambiar de signo, pero pasando esta vez por cero. El signo de $d\mathbf{p}/d\mathbf{q}$ es la función

$$\text{sign}\left(\frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}}\right) = \begin{cases} +1 & \frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}} > 0 \\ -1 & \frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}} < 0 \end{cases} \quad (\text{A-3})$$

quedando indefinida cuando $d\mathbf{p}/d\mathbf{q} = 0$. La función signo esta definida en función de z en todos los puntos de la trayectoria excepto en las singularidades en las representaciones \mathbf{q} y \mathbf{p} . A partir de $\text{sign}\left(\frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}}\right)$ se define la *función índice de Maslov*, que al igual que la función de acción, tiene distintas formas en distintas representaciones. Definimos $\sigma_{\mathbf{q}}(z)$ como la función índice en la representación de coordenadas y $\sigma_{\mathbf{p}}(z)$ en la de momentos. Estas funciones tienen un valor entero constante entre dos puntos de retorno de su representación, y están relacionadas de la forma

$$\sigma_{\mathbf{q}}(z) = \sigma_{\mathbf{p}}(z) - \text{sign}\left(\frac{d\mathbf{p}}{d\mathbf{q}}\right) \quad (\text{A-4})$$

Esta última relación es válida cuando z no es un punto de retorno ni en \mathbf{q} ni en \mathbf{p} .

Para determinar los valores de $\sigma_{\mathbf{q}}(z)$ y $\sigma_{\mathbf{p}}(z)$ se escoge un punto en la trayectoria (que no sea un punto de retorno) para el cual fijamos

$$\sigma_{\mathbf{q}}(z^0) = 0 \quad (\text{A-5})$$

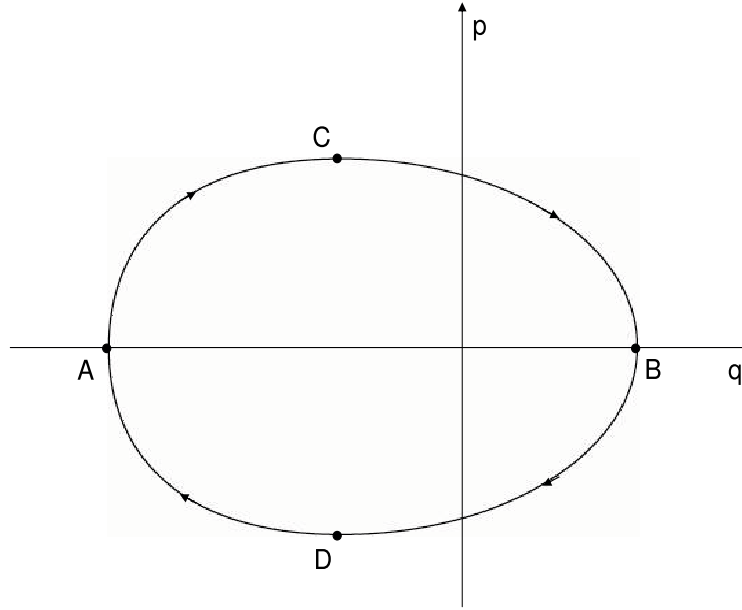


Figura A.1: *Diagrama del espacio de fases de un oscilador*

Normalmente el punto z se escoge de modo que $S_q(z^0)$ sea también cero.

Tomamos como ejemplo el diagrama de fases de un oscilador típico representado en la figura (C.1). Escogemos C como el punto z^0 , de modo que $\sigma_q = 0$ para el tramo ACB , donde A y B son puntos de retorno en la representación de coordenadas y no existe ningún otro punto de retorno entre ellos en esta representación. En el segmento CB , $\text{sign}\left(\frac{dp}{dq}\right) = -1$, y aplicando la ecuación (A-4), $\sigma_p = 1$. Como el valor de σ_p debe mantenerse constante entre dos puntos de retorno de su representación, esto implica que en todo el tramo CBD σ_p es igual a uno. Para que esto sea posible, el valor de σ_q al atravesar el punto de retorno en coordenadas B , ha debido cambiar su valor de 0 a 2, para seguir respetando la ecuación (A-4). Por tanto σ_q es una función discontinua cuando z es un punto de retorno, con una discontinuidad de magnitud 2. Si seguimos la evolución en σ_q hasta cerrar la trayectoria de nuevo en C , vemos que tras una vuelta, $\sigma_q = 4$. En la tabla (A.1) se recogen los valores de $\sigma_q(z)$ y $\sigma_p(z)$ en los distintos segmentos de la trayectoria, separados por los puntos de retorno.

Llamamos $[\sigma]$ al cambio en σ_q en una vuelta a una trayectoria cerrada. El cambio que sucede en σ_p es el mismo. Definimos el *índice canónico de Maslov*, μ , en

Tramo	A	C	B	D	A	C
σ_q	0	0	2	2	4	
σ_p	-1	1	1	3	3	

Cuadro A.1: *Funciones índice σ_q y σ_p para el oscilador de la figura (C.1)*

términos de σ_q con la relación

$$\mu = \frac{[\sigma]}{2} \quad (\text{A-6})$$

Para el ejemplo considerado $[\sigma] = 4$ y $\mu = 2$.

A.3. Mecánica semiclásica y condiciones de cuantización

Ahora vamos a mostrar como la función índice de Maslov y el índice canónico de Maslov aparecen de forma natural en teoría semiclásica. Por sencillez, llevamos a cabo el desarrollo en un grado de libertad. Comenzamos por definir una función de onda semiclásica truncada, que es no nula para un rango limitado, R , del espacio de configuraciones, q , y presenta la forma

$$\begin{aligned} \psi_q(z) &= B_q(z) \exp \left[i \left(\frac{S_q(z)}{\hbar} - \frac{\sigma_q \pi}{4} \right) \right] \quad (q \in R) \\ \psi_q(z) &= 0 \quad (q \notin R) \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

donde $S_q \in \mathbb{R}$ es la función de acción, y $B(q)$ es responsable de la normalización de la función. σ_q permite tener en cuenta los saltos que se producen en el valor de S_q en las cáusticas. La función de onda, $\psi(q)$, puede transformarse en una función en la representación de momentos a través de una transformada de Fourier

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_p(z) &= \bar{B}_p(z) \exp \left[i \left(\frac{\bar{S}_p(z)}{\hbar} - \frac{\bar{\sigma}_p \pi}{4} \right) \right] \quad (p \in \bar{R}) \\ \bar{\psi}_p(z) &= 0 \quad (p \notin \bar{R}) \end{aligned} \quad (\text{A-8})$$

donde \bar{R} es el rango en p correspondiente al rango R en q y

$$\begin{aligned} \bar{S}_p(z) &= S_q(z) - qp \\ \bar{B}_p(z) &= \frac{B_q(z)}{|dp/dq|^{1/2}} \\ \bar{\sigma}_p &= \sigma_q - \text{sign} \left(\frac{dp}{dq} \right). \end{aligned} \quad (\text{A-9})$$

Todas las funciones anteriores están definidas únicamente en R para \mathbf{q} , y en \bar{R} para \mathbf{p} .

Por tanto, la transformación de la función de onda truncada semiclásica depende únicamente de la transformación de la acción y de las funciones índice de Maslov, que son puramente clásicas. Truncar la función de onda es una operación artificial, pero tiene sentido en sistemas ligados, en los que existen barreras naturales para $\psi_{\mathbf{q}}(z)$ y $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$. Por ejemplo, en la figura (C.1) los puntos A y B son fronteras para $\psi_{\mathbf{q}}(z)$, y C y D para $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$. A la hora de definir una función de ondas sobre una curva C en el espacio de fases debemos tener en cuenta que

1. Para cada tramo de C en la representación de coordenadas, $\psi_{\mathbf{q}}(z)$ tiene la forma de la ecuación (A-7).
2. Para cada tramo de C en la representación de momentos, $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$ tiene la forma de la ecuación (A-8).
3. Para cada tramo de C , $\psi_{\mathbf{q}}(z)$ y $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$ están relacionadas a partir de (A-9).
4. En una curva C cerrada, las funciones $\psi_{\mathbf{q}}(z)$ y $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$ deben ser unívocas.

Las condiciones de cuantización surgen de 1 y 4. Pasando una vez a lo largo de la curva, ni S ni σ son unívocas, pero la condición 4 exige que $\psi_{\mathbf{q}}(z)$ y $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}(z)$ lo sean. Por una cuestión de consistencia, el incremento en el exponente de la ecuación (A-7) debe ser un múltiplo entero de 2π . Esto es, en la representación de coordenadas

$$\frac{[S_{\mathbf{q}}(z)]}{\hbar} - \frac{[\sigma_{\mathbf{q}}]\pi}{4} = 2\pi n \quad (\text{A-10})$$

Usando la definición de índice de Maslov $\mu = [\sigma_{\mathbf{q}}]/2$, obtenemos la condición de cuantización EBK (A-2) en un grado de libertad

$$S_{\mathbf{q}}(z) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right). \quad (\text{A-11})$$

En el review de Percival [76] puede encontrarse más información acerca de la teoría semiclásica de estados ligados, condiciones de cuantización y la función índice de Maslov.

Apéndice B

Traslaciones en el espacio de fases. Operadores de Heisenberg

B.1. Operadores de Heisenberg en mecánica clásica

La idea básica de los operadores de Heisenberg es que trasladan funciones en el espacio de fases. Un operador de Heisenberg se parametriza a través de un punto \mathbf{z}_0 en el espacio de fases, y representa un vector desplazamiento desde el origen a \mathbf{z}_0 . Llamamos a este operador $T_{cl}(\mathbf{z}_0)$, y su efecto sobre un punto \mathbf{z} del espacio de fases es el de una simple adición vectorial

$$T_{cl}(\mathbf{z}_0)\mathbf{z} = \mathbf{z} + \mathbf{z}_0 \quad (\text{B-1})$$

Una versión diferente de este operador actúa sobre funciones de distribución clásicas de Liouville, produciendo el efecto de mover todas las partículas que constituyen la función de distribución con un mismo desplazamiento \mathbf{z}_0 , de modo que las superficies de contorno se desplazan rígidamente en \mathbf{z}_0 . Llamamos

$$g = T_{cl}(\mathbf{z}_0)f \quad (\text{B-2})$$

a la nueva función de distribución y tenemos que

$$g(\mathbf{z}) = [T_{cl}(\mathbf{z}_0)f](\mathbf{z}) = f(\mathbf{z} - \mathbf{z}_0) \quad (\text{B-3})$$

donde el signo negativo es necesario para obtener los valores esperados clásicos correctos. Así

$$\int \mathbf{z}g(\mathbf{z})d^{2N}\mathbf{z} = \mathbf{z}_0 + \int \mathbf{z}f(\mathbf{z})d^{2N}\mathbf{z} \quad (\text{B-4})$$

de modo que los valores esperados clásicos se desplazan en \mathbf{z}_0 .

La transformación: $\mathbf{z}' = \mathbf{z} + \mathbf{z}_0$, inducida por el operador de Heisenberg es canónica. Es conveniente considerar esta transformación como perteneciente a una familia de transformaciones, escalando \mathbf{z}_0 con un parámetro t

$$\mathbf{z}'(t) = \mathbf{z} + t\mathbf{z}_0 \quad (\text{B-5})$$

de modo que $\mathbf{z}'(0) = \mathbf{z}$ y $\mathbf{z}'(1) = \mathbf{z}'$. Esto puede verse como la evolución temporal a través del Hamiltoniano clásico, donde \mathbf{z} sería la condición inicial para $t = 0$ y \mathbf{z}' la condición final en $t = 1$. Este escalado tiene el efecto de integrar el desplazamiento en un grupo de desplazamientos de un parámetro siempre a lo largo de la línea definida por \mathbf{z}_0 . El hamiltoniano que describe la evolución $\mathbf{z}'(t)$ se escribe como $H(\mathbf{z}', \mathbf{z}_0)$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{z}'(t) = \mathbf{J} \frac{\partial H(\mathbf{z}', \mathbf{z}_0)}{\partial \mathbf{z}'} = \mathbf{z}_0. \quad (\text{B-6})$$

Sea $\omega = \mathbf{J}^{-1}$, y eliminando la prima

$$\frac{\partial H(\mathbf{z}, \mathbf{z}_0)}{\partial \mathbf{z}} = \omega \mathbf{z}_0. \quad (\text{B-7})$$

Se resuelve la ecuación diferencial para $H(\mathbf{z}, \mathbf{z}_0)$

$$H(\mathbf{z}, \mathbf{z}_0) = \tilde{\mathbf{z}}\omega\mathbf{z}_0 = \omega(\mathbf{z}, \mathbf{z}_0) = \mathbf{p}\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}\mathbf{p}_0. \quad (\text{B-8})$$

Hemos obtenido la función hamiltoniana que da la evolución $\mathbf{z}'(t) = \mathbf{z} + t\mathbf{z}_0$ en forma simpléctica, que no es otra cosa que el generador clásico de movimientos en el espacio de fase.

B.2. Operadores de Heisenberg en mecánica cuántica

En mecánica cuántica los operadores $\hat{\mathbf{q}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ no conmutan, y sus valores esperados para un estado $|\psi\rangle$ pueden escribirse, en estructura matricial como

$$\mathbf{z} = \langle \hat{\mathbf{z}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{z}} | \psi \rangle \quad (\text{B-9})$$

El operador de Heisenberg cuántico tiene la propiedad de que si $|\psi\rangle$ tiene el valor esperado \mathbf{z} (ecuación B-9), entonces $T(\mathbf{z}_0)|\psi\rangle$ tiene el valor esperado $\mathbf{z} + \mathbf{z}_0$, es decir

$$\langle \psi | T(\mathbf{z}_0)^\dagger \hat{\mathbf{z}} T(\mathbf{z}_0) | \psi \rangle = \mathbf{z} + \mathbf{z}_0. \quad (\text{B-10})$$

Para que esto se cumpla, necesitamos que

$$T(\mathbf{z}_0)^\dagger \hat{\mathbf{z}} T(\mathbf{z}_0) = \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{z}_0 \quad (\text{B-11})$$

que constituye la *propiedad fundamental del operador de Heisenberg* (Ver [9] para su demostración).

Ahora vamos a proceder a la construcción del operador de Heisenberg cuántico. Para ello partimos del operador evolución en mecánica cuántica

$$\hat{U}(t) = \exp \left[\frac{iHT}{\hbar} \right] \quad (\text{B-12})$$

Sustituyendo la ecuación (B-8) en (B-12), llegamos a la expresión habitual del operador de Heisenberg

$$T(\mathbf{z}_0) = \exp \left[\frac{H(\hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}_0)T}{\hbar} \right] = \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \omega(\hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}_0) \right] = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_0 \hat{\mathbf{q}} - \mathbf{q}_0 \hat{\mathbf{p}}) \right] \quad (\text{B-13})$$

donde se ha cambiado \mathbf{z} por $\hat{\mathbf{z}}$. Al igual que en el caso clásico, se puede integrar el operador de Heisenberg cuántico en una familia parametrizada por t , cambiando \mathbf{z}_0 por $t\mathbf{z}_0$, y considerar la evolución en t que resulta. Si $|\psi_0\rangle$ es un estado inicial, a tiempo t llegamos a $|\psi\rangle = T(t\mathbf{z}_0)|\psi_0\rangle$ y obtenemos la siguiente ecuación diferencial para $|\psi\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \omega(\hat{\mathbf{z}}, \mathbf{z}_0)|\psi\rangle = (\mathbf{p}_0 \hat{\mathbf{q}} - \mathbf{q}_0 \hat{\mathbf{p}})|\psi\rangle. \quad (\text{B-14})$$

Resolviendo esta ecuación, que no es más que una versión de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, se llega a los elementos de matriz de $T(\mathbf{z}_0)$. Para la representación de coordenadas x tenemos

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle(x, t)}{\partial t} = -i\hbar q_0 \nabla \psi - (p_0 x) \psi \quad (\text{B-15})$$

y resolviendo

$$\psi(x, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(t p_0 x - \frac{t^2}{2} p_0 q_0 \right) \right] \psi_0(x - t q_0). \quad (\text{B-16})$$

Con $t = 1$ tenemos

$$[T(\mathbf{z}_0)\psi](x) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_0 x - \frac{1}{2} p_0 q_0 \right) \right] \psi_0(x - q_0) \quad (\text{B-17})$$

que es la fórmula explícita para la acción del operador de Heisenberg sobre funciones de onda en la representación x .

A partir de la ecuación (B-17) obtenemos directamente los elementos de matriz $T(\mathbf{z}_0)$ en el espacio de configuraciones x

$$\langle x | T(\mathbf{z}_0) | x' \rangle = \exp \left[\frac{i p_0}{2\hbar} (x + x') \right] \delta(x - x' - q_0). \quad (\text{B-18})$$

B.2.1. Propiedades de los operadores de Heisenberg

Los operadores de Heisenberg son unitarios, como se deduce de la ecuación (B-13) y por tanto

$$T(\mathbf{z}_0)^{-1} = T(-\mathbf{z}_0) = T(\mathbf{z}_0)^\dagger. \quad (\text{B-19})$$

Mientras que los operadores de Heisenberg clásicos conmutan entre sí, ya que sólo representan el vector adición,

$$T_{cl}(\mathbf{z}_0)T_{cl}(\mathbf{z}_1) = T_{cl}(\mathbf{z}_1)T_{cl}(\mathbf{z}_0) = T_{cl}(\mathbf{z}_0 + \mathbf{z}_1) \quad (\text{B-20})$$

los operadores de Heisenberg cuánticos no conmutan:

$$T(\mathbf{z}_0)T(\mathbf{z}_1) = \exp\left[\frac{i}{2\hbar}\omega(\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1)\right]T(\mathbf{z}_0 + \mathbf{z}_1) \quad (\text{B-21})$$

La fase de la ecuación (B-21) impide que los operadores conmuten.

Apéndice C

Operadores metaplécticos

Consideramos una transformación homogénea y lineal

$$\hat{\mathbf{z}}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \rightarrow \hat{\mathbf{Z}}(\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{P}}). \quad (\text{C-1})$$

Si la transformación anterior es canónica, podemos escribir

$$\hat{\mathbf{Z}} = \mathbf{S}\hat{\mathbf{z}} \quad (\text{C-2})$$

donde \mathbf{S} es una matriz simpléctica. La transformación (C-2) permite especificar un operador unitario $\mathbf{R}(\mathbf{S})$, parametrizado por la matriz simpléctica \mathbf{S} , de modo que se cumpla

$$\mathbf{R}(\mathbf{S})^\dagger \hat{\mathbf{z}} \mathbf{R}(\mathbf{S}) = \hat{\mathbf{Z}}. \quad (\text{C-3})$$

El operador $\mathbf{R}(\mathbf{S})$ definido de esta forma es un operador metapléctico. Algunas propiedades importantes de estos operadores son las siguientes

$$\mathbf{R}_{cl}(\mathbf{S})\mathbf{z} = \mathbf{S}\mathbf{z} \quad \text{sobre vectores} \quad (\text{C-4})$$

$$\mathbf{R}_{cl}(\mathbf{S})f(\mathbf{z}) = [\mathbf{R}_{cl}(\mathbf{S})f]\mathbf{z} = \mathbf{S}f(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{z}) \quad \text{sobre funciones} \quad (\text{C-5})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{S}_1)\mathbf{R}(\mathbf{S}_2) = \pm\mathbf{R}(\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2) \quad (\text{C-6})$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{S})^{-1} = \mathbf{R}(\mathbf{S})^\dagger = \pm\mathbf{R}(\mathbf{S}^{-1}) \quad (\text{C-7})$$

Apéndice D

Primeras 160 autofunciones de simetría A_1 del oscilador cuártico y sus energías

En este apéndice se recogen en el cuadro (D.1) las energías correspondientes a las 160 primeras autofunciones de simetría A_1 sistema cuártico y la representación en el espacio de configuraciones correspondiente a cada función (figuras D.1-D.8).

Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)	Estado	Energía (u.a.)
1	0.56323	41	26.1205	81	42.9451	121	57.0224
2	1.88478	42	26.5303	82	43.1937	122	57.3525
3	2.86379	43	27.0975	83	43.8327	123	57.7307
4	3.85629	44	27.4024	84	43.8645	124	58.0616
5	4.82859	45	28.0964	85	44.3696	125	58.1066
6	5.25843	46	28.7265	86	44.7073	126	58.5187
7	6.21255	47	28.9455	87	44.8625	127	58.9910
8	7.41148	48	29.3417	88	45.5770	128	59.5659
9	7.90522	49	29.4745	89	45.8312	129	59.6677
10	8.69471	50	30.2249	90	45.9271	130	60.0769
11	9.30551	51	30.6766	91	46.6340	131	60.1751
12	10.0871	52	30.8445	92	46.9845	132	60.3792
13	10.6636	53	31.3230	93	47.1638	133	61.0815
14	11.4518	54	32.0305	94	47.7092	134	61.3770
15	11.9595	55	32.5273	95	47.8198	135	61.7360
16	12.7904	56	32.8119	96	48.6632	136	62.0019
17	13.1403	57	33.2259	97	48.6891	137	62.1124
18	14.2977	58	33.8008	98	48.9172	138	62.3006
19	14.7139	59	34.0956	99	49.3420	139	62.6046
20	15.0026	60	34.3736	100	49.8288	140	63.1875
21	15.8304	61	34.8707	101	50.1103	141	63.6060
22	16.0239	62	35.3733	102	50.3513	142	63.8934
23	16.9234	63	35.9824	103	50.8534	143	64.2234
24	17.3841	64	36.2249	104	51.4205	144	64.4449
25	17.9894	65	36.3327	105	51.5625	145	64.5519
26	18.5169	66	36.9031	106	51.8583	146	64.7649
27	18.9716	67	37.5196	107	52.2700	147	65.3489
28	19.9048	68	37.9145	108	52.6661	148	65.6664
29	20.1842	69	38.0872	109	53.0100	149	66.0023
30	20.5922	70	38.4815	110	53.5092	150	66.4546
31	21.1634	71	39.0833	111	53.8675	151	66.6008
32	21.9308	72	39.3292	112	53.9088	152	66.9139
33	22.2275	73	39.5322	113	53.9739	153	67.0125
34	22.4580	74	39.9864	114	54.2321	154	67.5978
35	23.2467	75	40.3537	115	55.1061	155	67.9762
36	23.7265	76	40.8243	116	55.3250	156	68.2176
37	24.0099	77	41.6924	117	55.4989	157	68.5903
38	24.6527	78	41.8336	118	55.9766	158	68.7322
39	25.2305	79	41.9213	119	56.3396	159	68.8575
40	25.5759	80	42.5104	120	56.5632	160	69.1528

Cuadro D.1: Energías de los 160 primeros estados de simetría A_1 del sistema cuártico

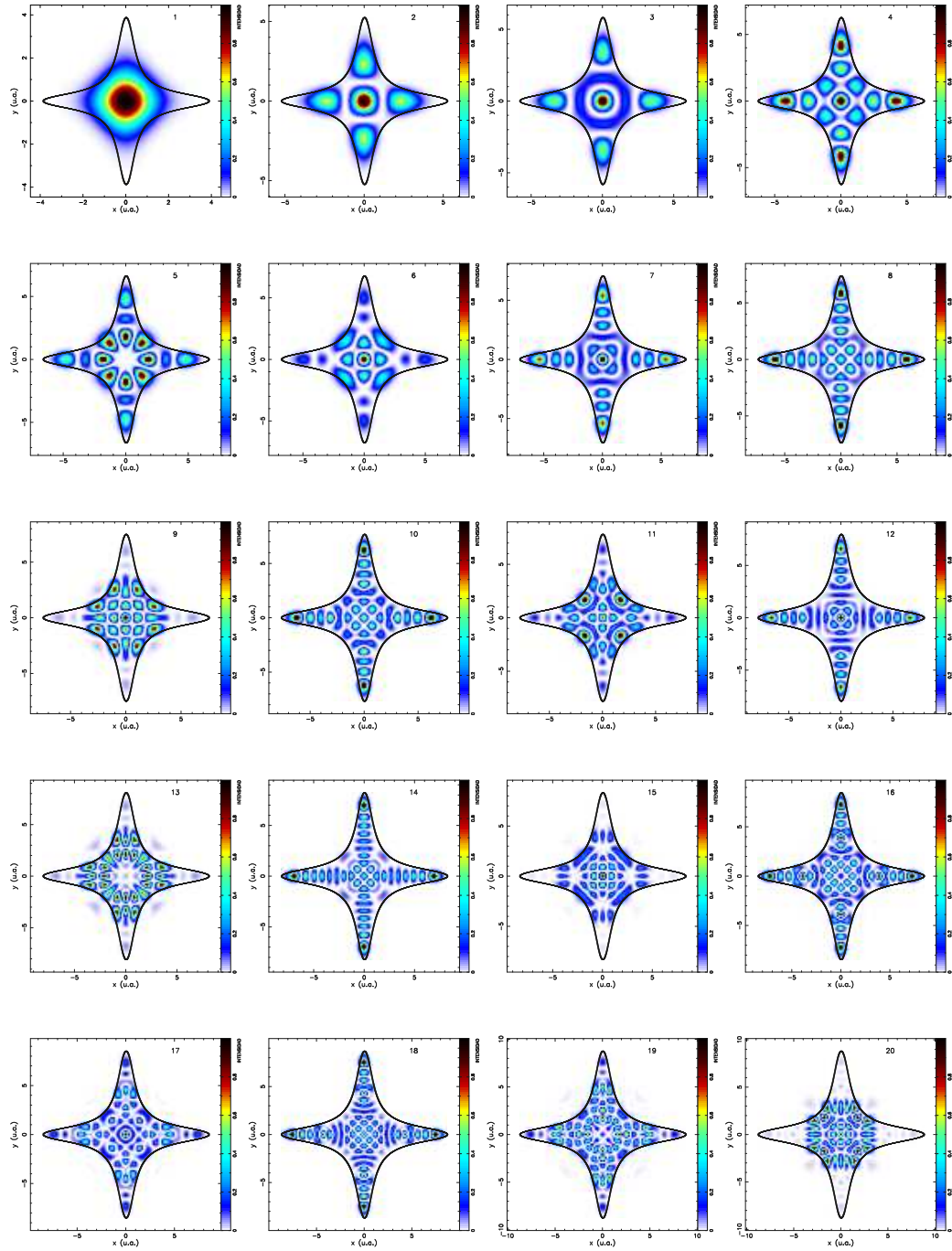


Figura D.1: *Intensidad $|\Psi(x,y)|^2$ para los estados $n = 1 - 20$ del sistema cuártico*

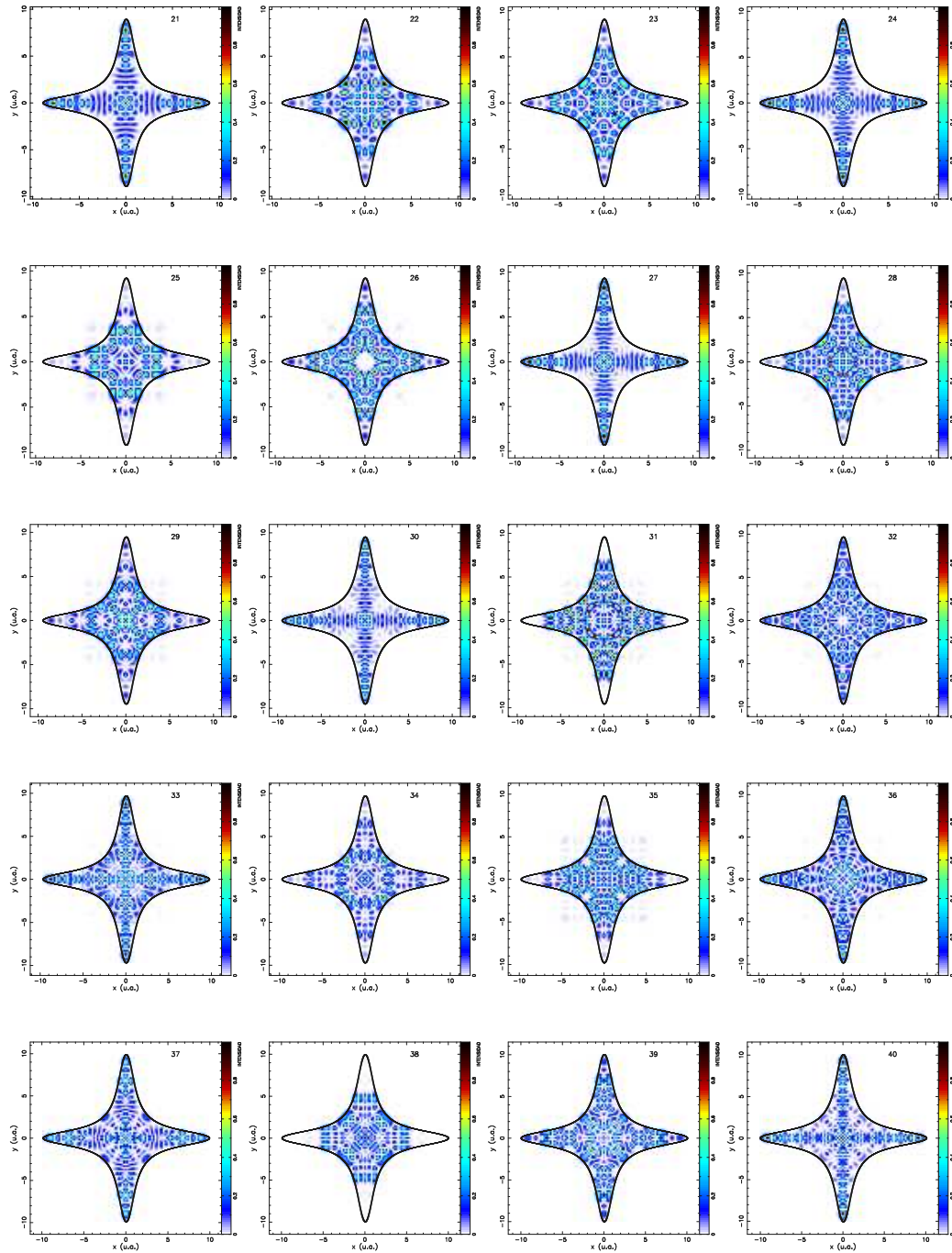


Figura D.2: Intensidad $(|\Psi(x, y)|^2)$ para los estados $n = 21 - 40$ del sistema cuártico

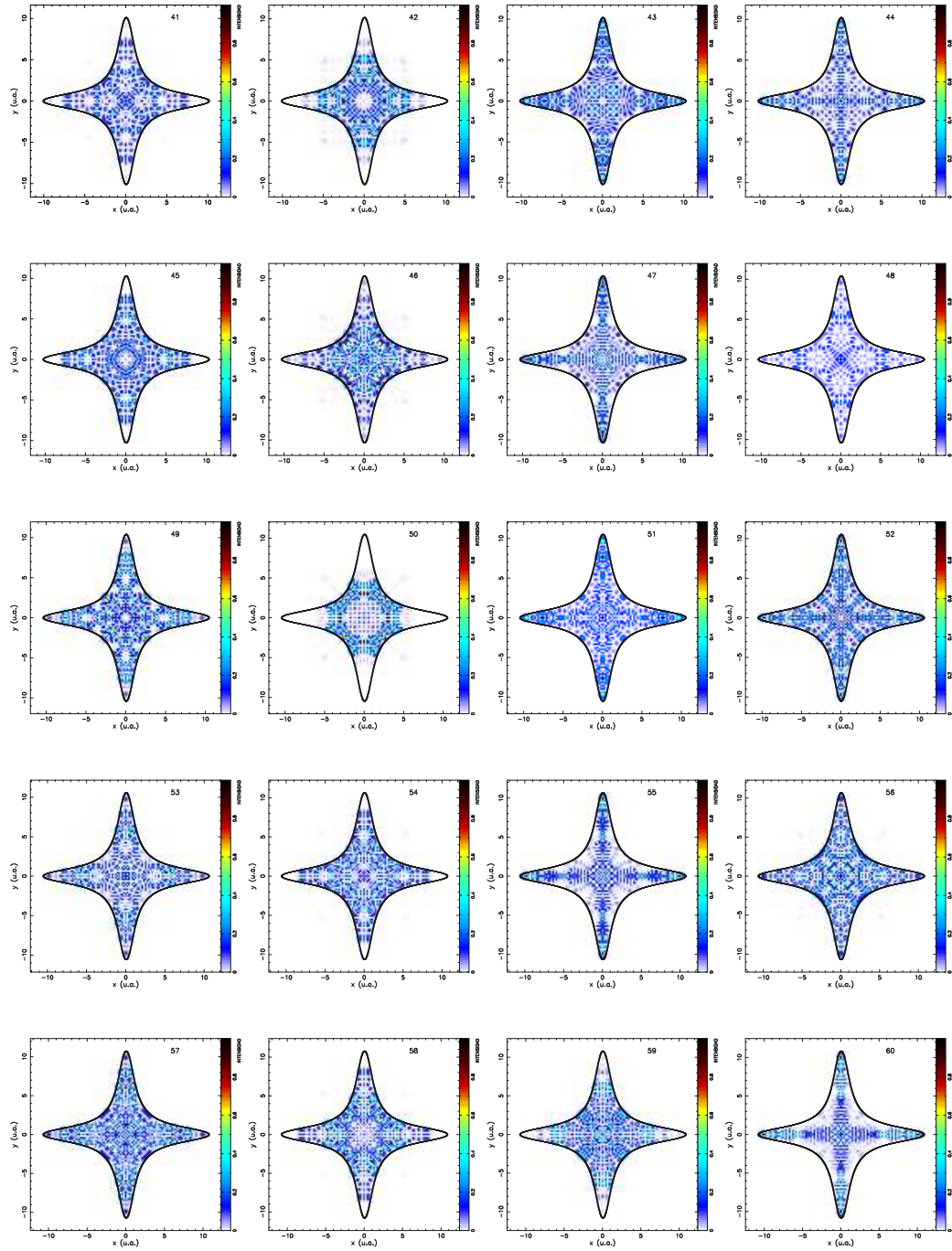


Figura D.3: $|\Psi(x, y)|^2$ para los estados $n = 41 - 60$ del sistema cuártico

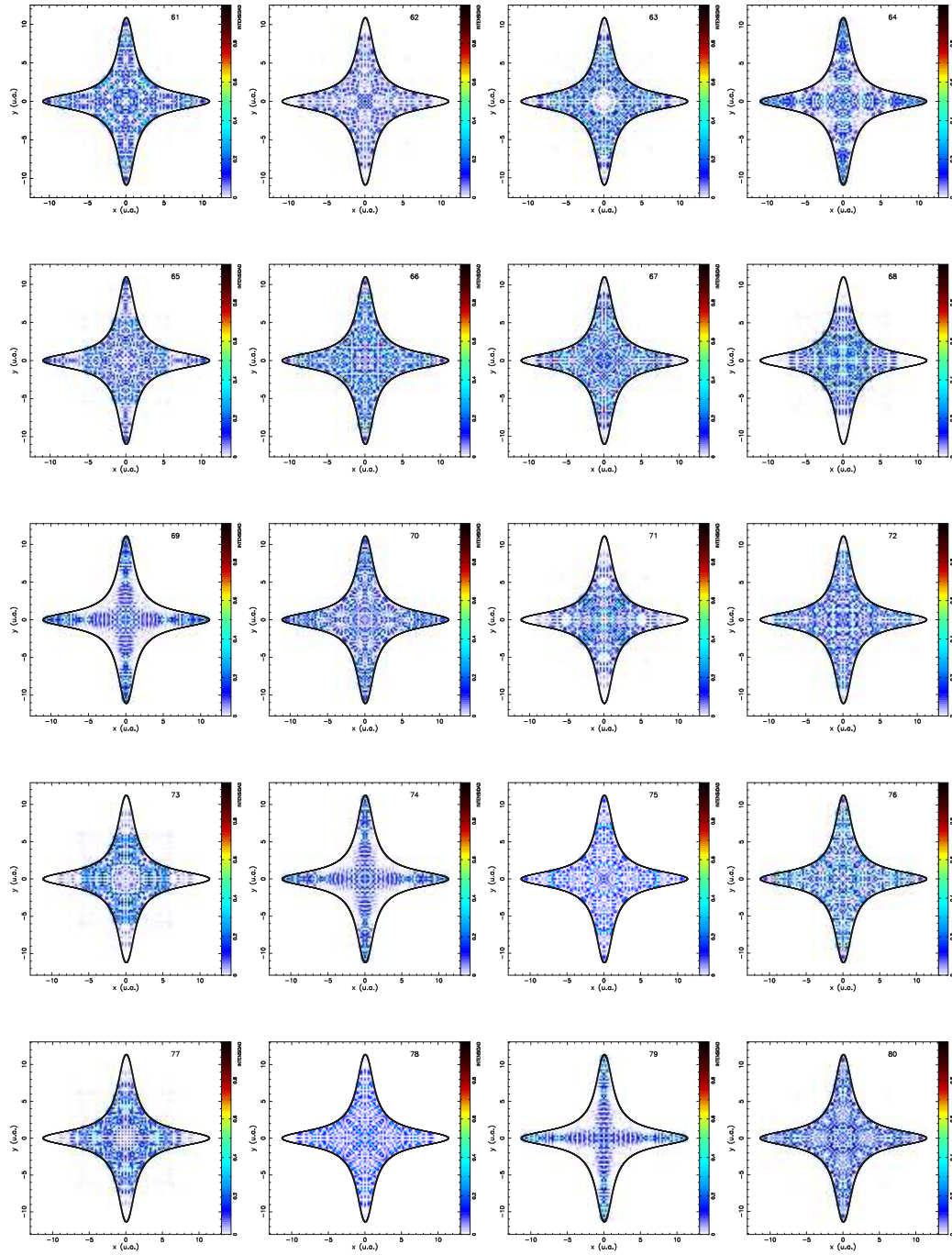


Figura D.4: *Intensidad $|\Psi(x,y)|^2$ para los estados $n = 61 - 80$ del sistema cuártico*

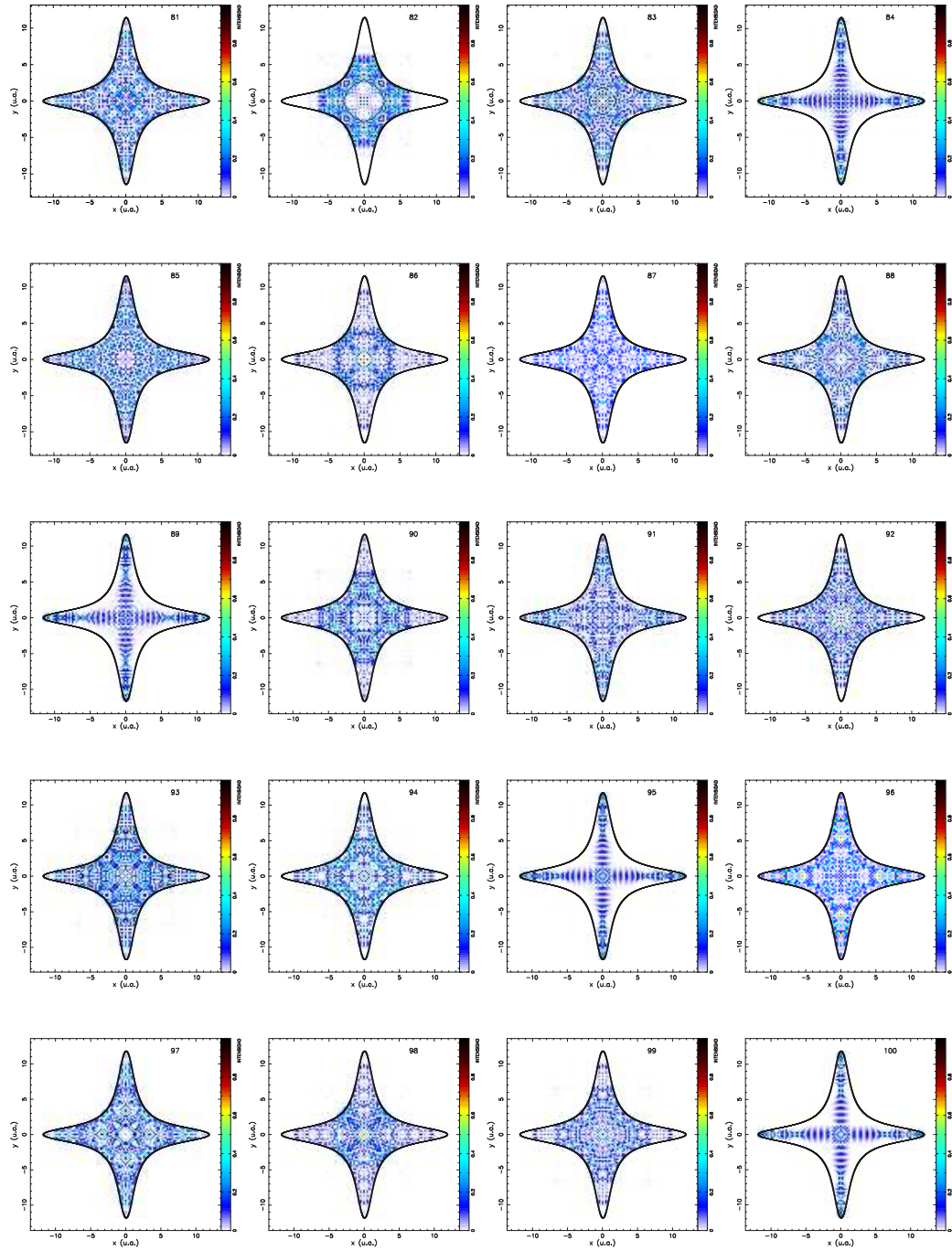


Figura D.5: *Intensidad ($|\Psi(x,y)|^2$) para los estados $n = 81 - 100$ del sistema cuártico*

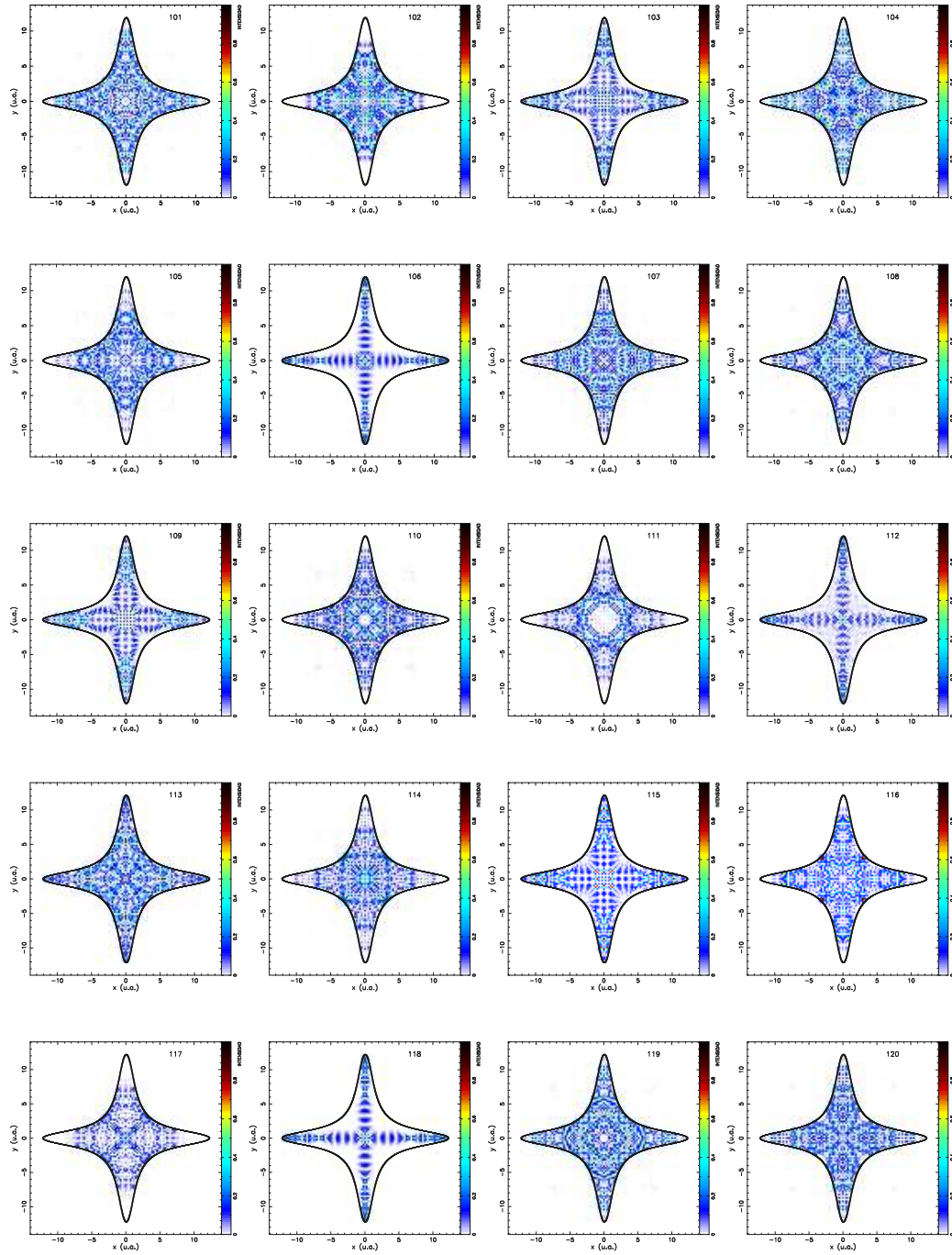


Figura D.6: $|\Psi(x, y)|^2$ para los estados $n = 101 - 120$ del sistema cuártico

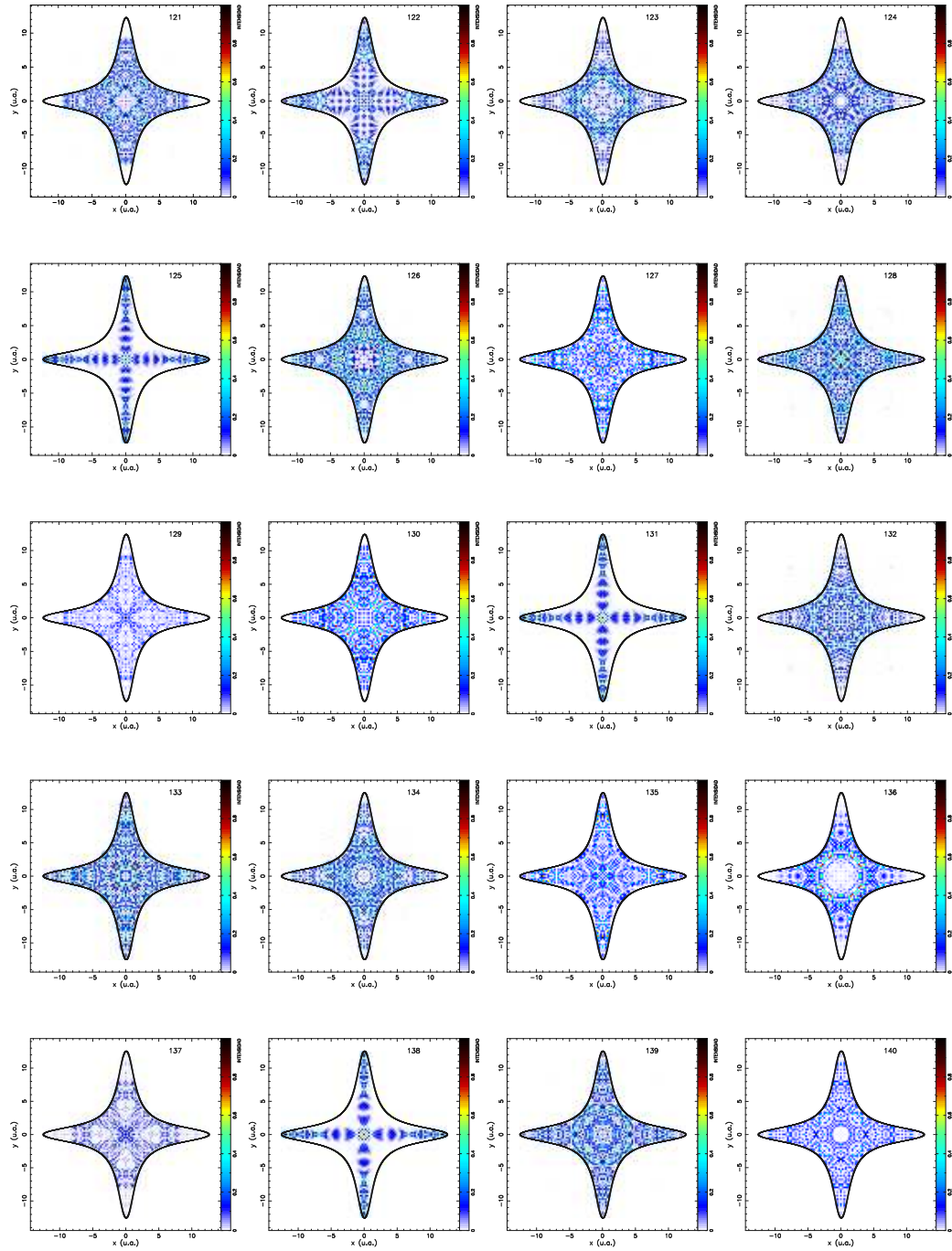


Figura D.7: *Intensidad $|\Psi(x, y)|^2$ para los estados $n = 121 - 140$ del sistema cuártico*

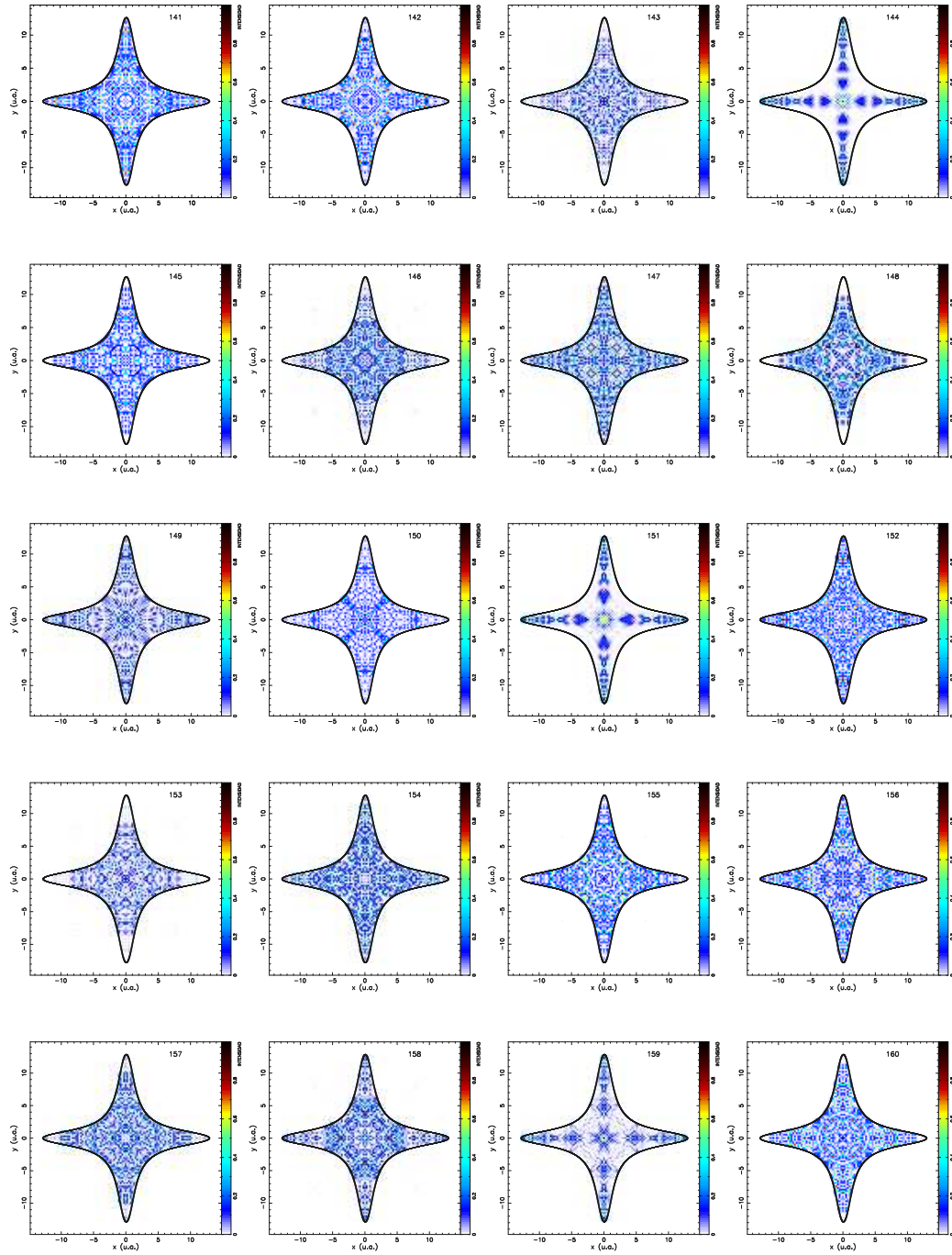


Figura D.8: $|\Psi(x, y)|^2$ para los estados $n = 141 - 160$ del sistema cuártico

Apéndice E

Funciones de scar sobre la órbita periódica lazo

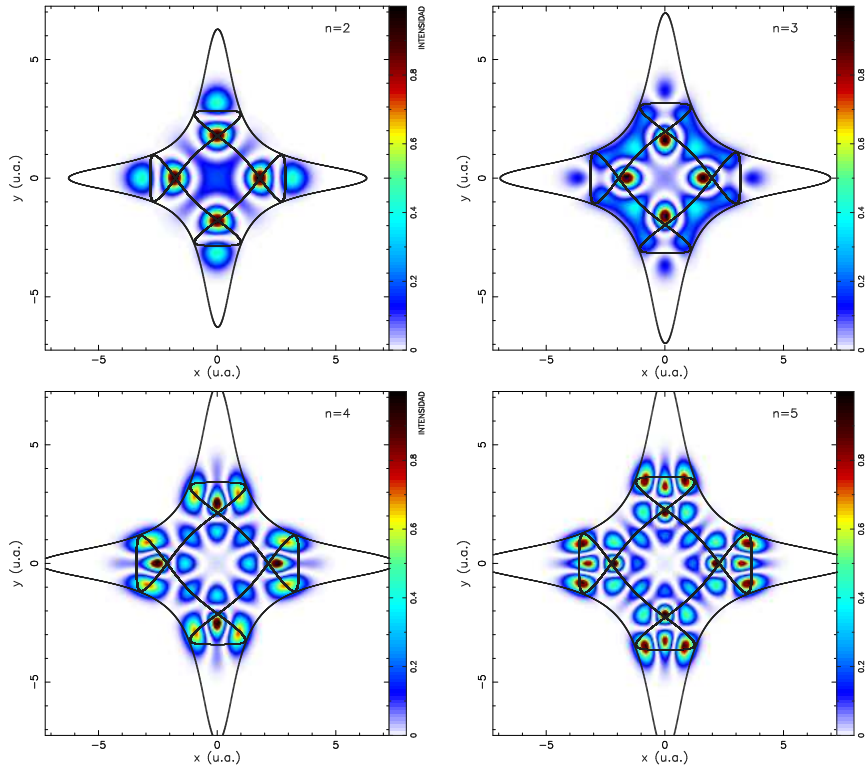


Figura E.1: *Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK [$S = 2\pi\hbar(4n + 3)$] en el espacio de configuraciones con n comprendido entre 2 y 5*

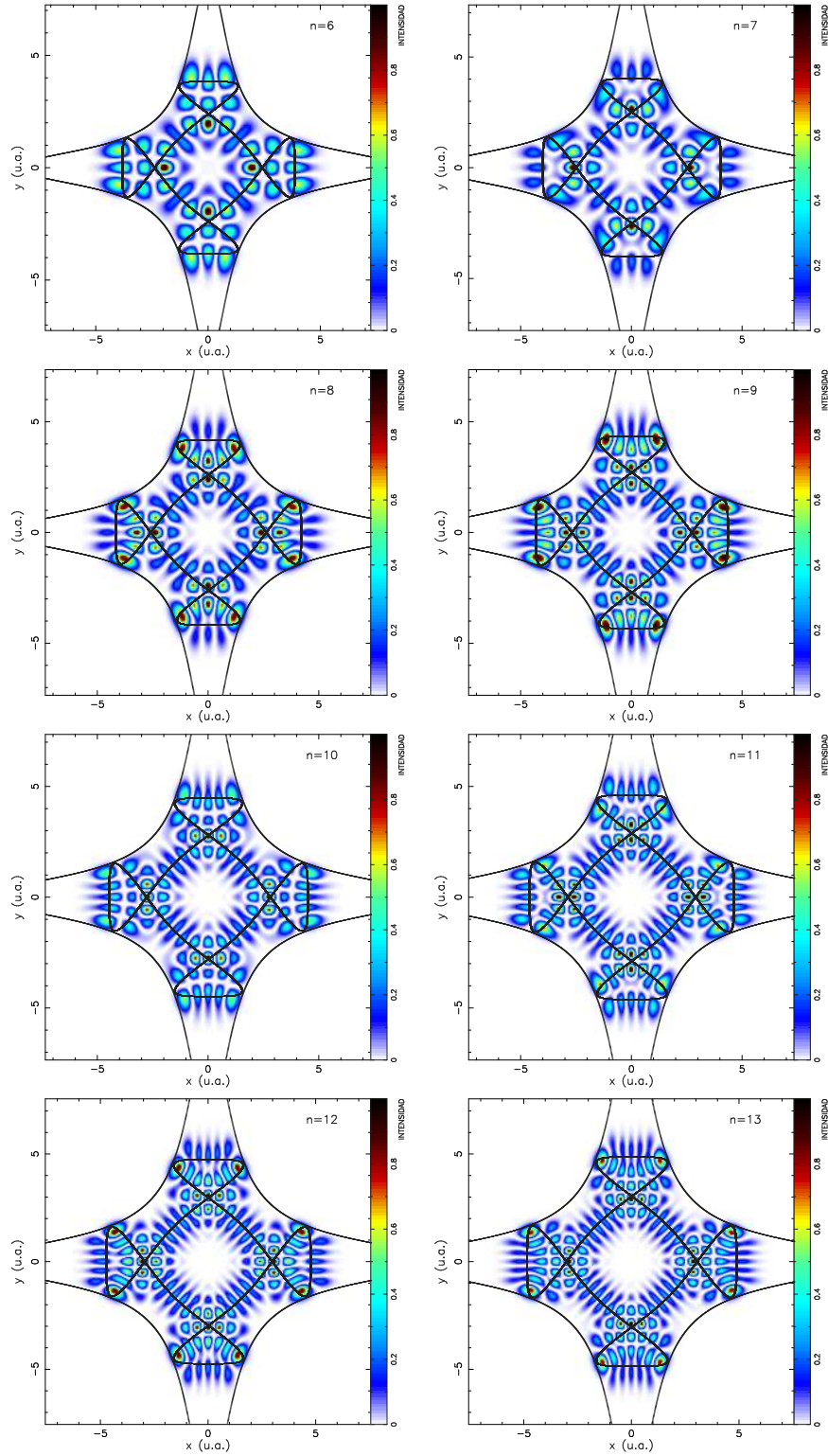


Figura E.2: *Cont. fig. (E). Intensidad $(|\Psi|^2)$ de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK $[S = 2\pi\hbar(4n + 3)]$ en el espacio de configuraciones con n comprendido entre 6 y 13*

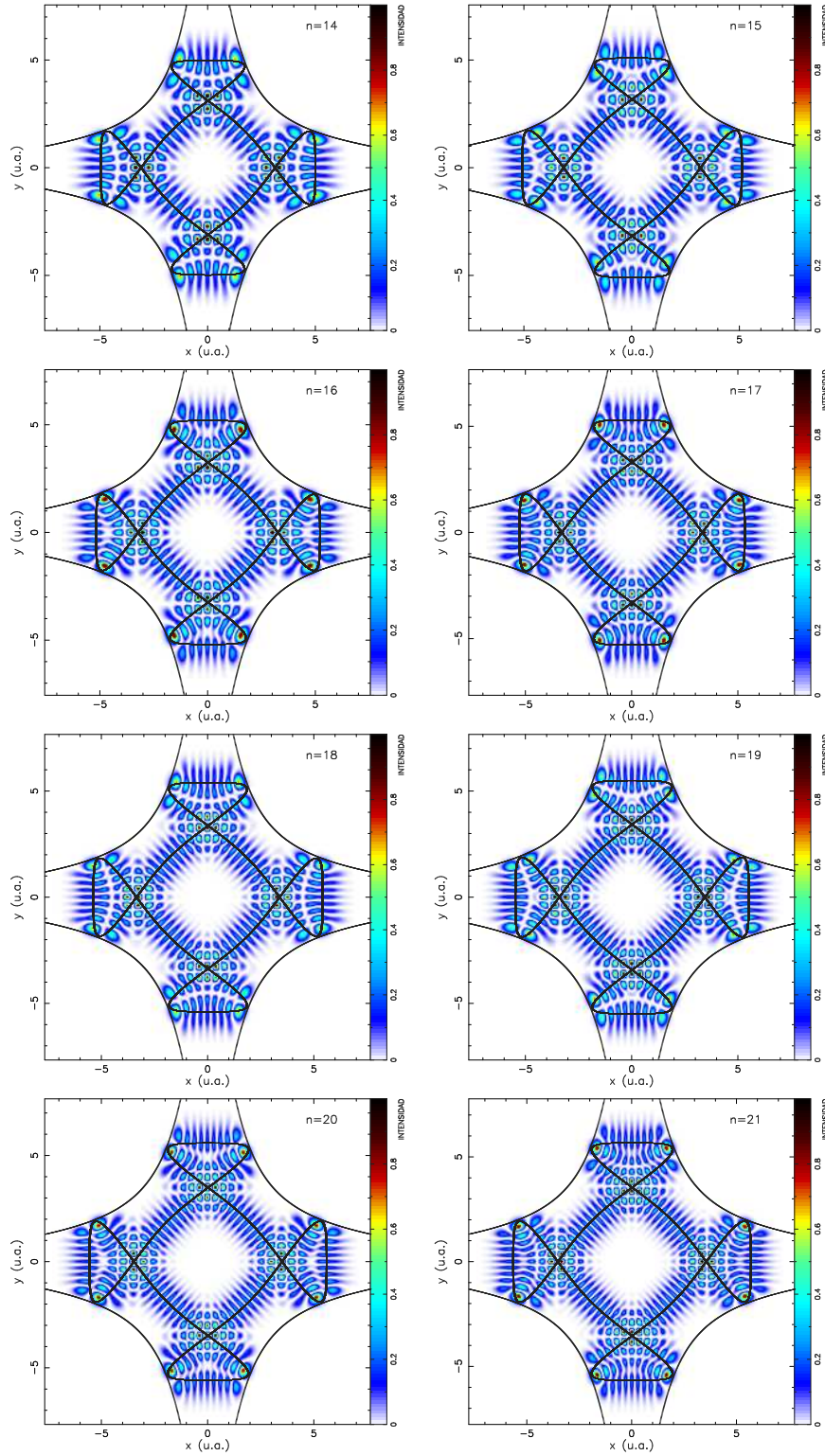


Figura E.3: *Cont. fig. (E). Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK [$S = 2\pi\hbar(4n + 3)$] en el espacio de configuraciones con n comprendido entre 14 y 21*

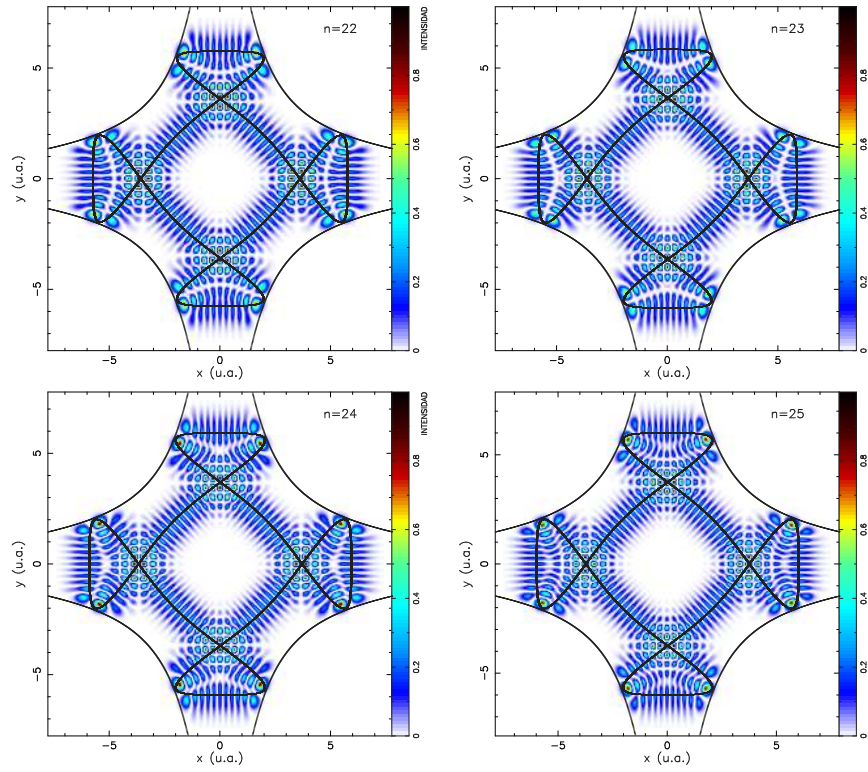


Figura E.4: *Cont. fig. (E). Intensidad ($|\Psi|^2$) de las funciones de scar obtenidas para la órbita lazo cuantizada a partir de la condición EBK en el espacio de configuraciones con n comprendido entre 22 y 25*

Bibliografía

- [1] P. S. Epstein, Ann. der Physik **50**, 489 (1916).
- [2] A. Einstein, Verhand. Deut. Phys. Ges. **19**, 84 (1917).
- [3] M. L. Brillouin, J. de Physique (Ser. 6) **7**, 353 (1926).
- [4] J. B. Keller, Ann. Phys. **4**, 180 (1958).
- [5] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **12**, 343 (1971).
- [6] O. Bohigas, M. J. Giannoni, y C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [7] E. J. Heller, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1985).
- [8] L. Kaplan, Nonlinearity **12**, R1 (1999).
- [9] R. Littlejohn, Phys. Reports **138**, 193 (1986).
- [10] G. de Polavieja, F. Borondo, y R. Benito, Phys. Rev. Lett. **73**, 1613 (1994).
- [11] H. Weyl, *The Classical Groups, their Invariants and Representations. 15th Edition*, Princeton University Press, Princeton, NJ (1997).
- [12] E. J. Heller, *Wavepacket dynamics and quantum chaology (Les Houches, 1989)*, North-Holland, Amsterdam (1991).
- [13] H. Goldstein, C. Poole, y J. Safko, *Classical Mechanics. Third Edition*, Addison Wesley (2002).
- [14] A. Kolmogorov, Dokl. Akad. Nauk. SSSR **98**, 527 (1954).
- [15] V. I. Arnold, Dokl. Akad. Nauk. SSSR **3**, 136 (1962).
- [16] J. K. Moser, *On Invariant Curves of Area-Preserving Mappings on an Annulus*, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen. Math. (1962).

- [17] A. J. Lichtenberg y M. A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion*, Springer-Verlag (1983).
- [18] R. A. Molina, Tesis Doctoral, *Caos Cuántico en Sistemas Hamiltonianos de Muchos Cuerpos*, Universidad Complutense de Madrid (2002).
- [19] B. Chirikov, Phys. Rep. **52**, 263 (1979).
- [20] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, y F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Wiley-Interscience (2006).
- [21] A. D. Stone, Physics Today **58:88**, 37 (2005).
- [22] R. A. Jalabert y H. M. Pastawski, Phys. Rev. Lett. **86**, 2490 (2001).
- [23] T. Prosen, J. Phys. A **65**, 036208 (2002).
- [24] H. J. Stöckmann y R. Schäffer, New J. Phys **6**, 1 (2004).
- [25] T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman, y M. Žnidarič, Phys. Rep. **435**, 33 (2006).
- [26] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **8**, 1979 (1967).
- [27] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **10**, 1004 (1969).
- [28] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **11**, 1791 (1970).
- [29] M. C. Gutzwiller, Physica D **5**, 183 (1982).
- [30] E. P. Wigner, Phys. Rev. **98**, 145 (1955).
- [31] C. E. P. (ed.), *Statistical Theories of Spectra*, Academic-Press New York (1965).
- [32] V. V. Flaumbaum, A. A. Gribakina, G. F. Gribakin, y M. G. Kozlov, Phys. Rev. A **50**, 267 (1994).
- [33] T. A. Brody, Lett. Nuovo Cimento **7**, 483 (1973).
- [34] T. A. Brody *et al.*, Rev. Mod. Phys. **53**, 385 (1981).
- [35] R. Blümel y W. P. Reinhardt, *Chaos in Atomic Physics*, Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics (1997).
- [36] M. V. Berry y N. L. Balazs, J. Phys. A **12**, 625 (1979).

-
- [37] S. McDonald y A. Kaufmann, Phys. Rev. Lett. **42**, 1189 (1979).
- [38] E. B. Bogomolny, Physica D **31**, 169 (1987).
- [39] E. G. Vergini, J. Phys. A **33**, 4709 (2000).
- [40] E. G. Vergini y G. G. Carlo, J. Phys. A **34**, 4525 (2000).
- [41] D. Wisniacki, E. Vergini, R. Benito, y F. Borondo, Phys. Rev. Lett. **94**, 054101 (2005).
- [42] F. Borondo *et al.*, J. Chem. Phys. **122**, 111101 (2005).
- [43] D. Wisniacki, E. Vergini, R. Benito, y F. Borondo, Phys. Rev. Lett. **97**, 094101 (2006).
- [44] S. Sridhar, Phys. Rev. Lett. **67**, 785 (1991).
- [45] J. Stein y H. Stöckmann, Phys. Rev. Lett. **68**, 2867 (1991).
- [46] T. M. Fromhold *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1142 (1995).
- [47] P. B. Wilkinson *et al.*, Nature **380**, 608 (1996).
- [48] V. Doya, O. Legrand, M. F, y C. Miniatura, Phys. Rev. Lett. **88**, 014102 (2002).
- [49] L. Kaplan y E. J. Heller, Ann. of Phys. **264**, 171 (1998).
- [50] E. J. Heller, J. Chem. Phys. **65**, 4979 (1976).
- [51] R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett. **56**, 2000 (1986).
- [52] E. J. Heller, Acc. Chem. Res. **14**, 368 (1981).
- [53] R. G. Gordon, Adv. Magn. Reson. **3**, 1 (1968).
- [54] M. C. Gutzwiler, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (1990).
- [55] E. P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [56] M. V. Berry, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **287**, 237 (1977).
- [57] K. Takahashi, Prog. Theoret. Phys. Suppl. **98**, 109 (1989).
- [58] H. W. Lee, Phys. Rep. **259**, 147 (1995).

- [59] F. J. Arranz, Tesis Doctoral, *Distribución de ceros de la función de Husimi del sistema molecular LiCN*, Universidad Autónoma de Madrid (1995).
- [60] Y. Kano, J. Math. Phys. **6**, 1913 (1965).
- [61] B. Eckhardt, G. Hose, y E. Pollak, Phys. Rev. A **39**, 166 (1989).
- [62] P. Dahlqvist y G. Russberg, Phys. Rev. Lett. **65**, 2837 (1990).
- [63] A. Sugito y H. Aiba, Phys. Rev. E **85**, 180 (2005).
- [64] T. Zimmermann, H.-D. Meyer, H. Köppel, y L. Cederbaum, Phys. Rev. A **33**, 4334 (1986).
- [65] E. J. Heller, J. Chem. Phys. **61**, 2923 (1981).
- [66] M. J. Davis y E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 246 (1981).
- [67] S. Tomsovic y E. J. Heller, Phys. Rev. E **68**, 038201 (2003).
- [68] F. Borondo y R. M. Benito, *Frontiers of Chemical Dynamics. p. 371 NATO ASI Series C*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1995).
- [69] J. Tennyson y B. T. Sutcliffe, J. Chem. Phys. **77**, 4061 (1982).
- [70] R. Essers, J. Tennyson, y P. E. S. Wormer, Chem. Phys. Lett **89**, 223 (1982).
- [71] P. E. S. Wormer, J. Chem. Phys. **75**, 1245 (1982).
- [72] J. Makarewicz y T. Ha, J. Mol. Struct. (Theochem) **315**, 149 (1994).
- [73] J. Makarewicz y T. Ha, Chem. Phys. Lett **232**, 497 (1995).
- [74] F. J. Arranz, Tesis Doctoral, *Transición Orden-Caos en el Sistema Molecular LiCN*, Universidad Autónoma de Madrid (1999).
- [75] C. W. Gear, J. Num. Anal. B **2**, 69 (1964).
- [76] I. C. Percival, Adv. Chem. Phys. **36**, 1 (1977).